

Смешивание вязких жидкостей

В. В. Мелешко

Киевский национальный университет имени Тараса Шевченко
01033, Киев, Украина, ул. Владимирская, 60
E-mail: meleshko@univ.kiev.ua

Т. С. Краснопольская

Институт гидромеханики Национальной Академии Наук
03057, г. Киев, Украина, ул. Желябова, 8/4
E-mail: kras@ihm.kiev.ua

Получено 28 октября 2004 г.

Работа посвящена методологическим аспектам исследования ламинарного смешивания. Анализ дистрибутивного смешивания основан на сохранении топологических свойств (связность и ориентация) граничного контура пятна, при его деформации в известном эйлеровом поле скорости. Основное преимущество такого подхода состоит в том, что обеспечивается сохранение площади пятна, ограниченного контуром, даже после довольно сложных деформаций растяжения и изгиба. И тем самым обеспечивается применение модифицированных критериев оценки качества смесей. В работе показано, как, имея решение для поля скоростей и используя слежение за линией контура пятна, а также описанные меры качества смесей, можно проанализировать процесс смешивания. На конкретном примере периодических вязких течений в кольцевой клинообразной полости продемонстрировано применение методологии исследования основных свойств механического ламинарного перемешивания в двумерных областях.

Методология основана на выполнении следующих шагов в анализе процесса: (1) получении аналитического решения для поля скоростей в полости; (2) слежении за изменениями течением любого контура, ограничивающего перемешиваемое пятно; (3) обнаружении всех периодических точек потока; (4) построении статистических количественных мер оценки качества перемешивания в любой момент времени.

Ключевые слова: перемешивание, смешивание, грубая плотность.

V. V. Meleshko, T. S. Krasnopskaya **Mixing of viscous fluids**

The paper presents a new methodology for investigating and evaluating the basic properties of distributive laminar mixing in creeping flows. Our analysis is based upon conservation of some topological properties (e.g. connectedness and orientation) of the Lagrangian interface line under continuous transformations induced by an Eulerian velocity field. The principal advantage of our approach for line tracking is that despite complicated stretching and folding, the area of the blob, enclosed by the contour, is preserved. This gives possibility to develop three criteria for estimating the quality of mixing. The objective of this article is to expound the methodology of investigation of distributive laminar mixing of highly viscous materials by considering a typical example of two-dimensional Stokes flow in an annular wedge cavity. Our methodology is based on the following steps: (1) determination of an analytical solution for the velocity field in the cavity; (2) observations on the deformation of the interface contour line of the stirring blob; (3) finding and classification of periodic points; (4) construction of statistical quantity measures for estimation of the quality of mixing at any given moment of time.

Keywords: mixing, stirring, coarse grained density.

Mathematical Subject Classifications: 76F20, 37N10, 76D07, 76F25

1. Введение

Явления и процессы смешивания жидкостей широко и постоянно встречаются в природе при переносе теплых или холодных масс воздуха или воды крупномасштабными вихревыми структурами и струями в атмосфере или океане [23, 48, 56, 64, 70], при распространении загрязнений в приливных течениях [24, 68], в лабораторных исследованиях хаотической адвекции [22, 63, 73, 74, 77] в различных разделах химической, нефтехимической, пищевой промышленности и при переработке полимеров [79], в современных био- и нанотехнологиях [76, 78] и даже в обыденной жизни при приготовлении утреннего кофе со сливками или вечернего алкогольного коктейля (приведенный в [19] пример смеси, состоящей из 20 % рома и 80 % кока-колы, известной как «Cuba libre», с тех пор цитировался неоднократно). Здесь указаны преимущественно публикации последних 15 лет, хотя к настоящему времени накоплены обширные экспериментальные и натурные данные о закономерностях ламинарного смешивания. Среди огромного множества публикаций можно указать целый ряд учебников и монографий [12, 20, 51, 55, 60], тематических сборников [1, 18, 39, 66, 81] и отдельных обзорных статей [29, 32, 40, 61, 62, 80], где даются практические рекомендации по проектированию конкретных промышленных и лабораторных миксеров и вырабатываются критерии оценки качества смешивания. Медленность движения жидкости и большие затраты энергии на их производство являются определяющими факторами при конструкции и выборе параметров миксеров.

Поскольку процесс смешивания так часто встречается как в промышленности, так и в повседневной жизни, что создается иллюзия полного понимания такого процесса. Это обстоятельство было отмечено ещё Рейнольдсом [67], который подчеркнул важность таких составляющих процесса смешивания как растяжение и складкообразование областей двух жидкостей, и, указав на кажущуюся простоту понимания самого процесса, заметил, что «общая идея смешивания настолько знакома нам, что широкое теоретическое обобщение, к которому эта идея дает ключ, остается не созданным». Интуитивно ясно, что хорошее смешивание означает, что окрашенная область (пятно), помещенная в начале процесса в определенном месте объема миксера, в конце процесса была бы распределена по всему объему так, чтобы в любом выбранном элементе всей области отношение объемов компонентов было бы таким же самым, каким оно было изначально в полной области.

С другой стороны, в математике и физике, начиная с работ Максвелла, Больцмана, Пуанкаре, Гиббса, выполненных во второй половине девятнадцатого—начале двадцатого века, большое внимание уделялось так называемым эргодическим системам, формулировке и доказательству эргодической гипотезы (см. [8, 25], где приведен обширный список литературы). Существует данное Пуанкаре [9] формально математическое определение смешивания, которое также восходит к фундаментальному трактату Гиббса [35], и затем было развито в середине тридцатых годов прошлого столетия в работах Биркгофа, фон Неймана и Хопфа (см., например, [16, 45, 72, 83] для детального изложения). Это определение формулируется [19] следующим образом: процесс, описываемый динамической системой дифференциальных уравнений или дискретных отображений является *перемешивающим*, если для любых заданных непересекающихся в начальный момент областей A и B с мерами $\mu(A)$ и $\mu(B)$, соответственно, в объеме V меры $\mu(V)$, мера $\mu(A \cap B)$ отображения области A на область B с течением времени стремится к величине $\mu(A)\mu(B)/\mu(V)$. Заметим, что это достаточно сильное требование к динамике системы: для того, чтобы динамическая система обладала свойством перемешивания необходимо, но не достаточно, чтобы она обладала возвращаемостью траекторий и эргодичностью (что означает, что осреднение по пространству стремиться со временем к среднему по времени). В то же время системы с перемешиванием не обязательно являются хаотическими K -системами [13].

Одной из первых работ, посвященных построению научного фундамента процесса смешивания двух жидкостей, разных по свойствам (например, по плотности, солёности, вязкости или цвету) была статья Эккарта [28]. На повседневном примере перемешивания кофе и сливок он предложил выделить три четкие стадии процесса:

1. *Начальная* стадия, при которой четко различимы по цвету объёмы кофе и сливок. При этом имеется резкий градиент на границе между этими двумя жидкостями, в то время как внутри каждой из них такой градиент практически отсутствует. Усредненный по всему объёму чашки градиент «цветности» весьма мал. Если избегать движения двух жидкостей, то это состояние может длиться весьма долго.

2. *Промежуточная* стадия, которая возникает при наличии движения (адвекции) жидкостей. Объёмы кофе и сливок изменяют форму, они растягиваются и изгибаются. При этом происходит резкое увеличение граничной поверхности с большим градиентом и, следовательно, усредненный по всему объёму градиент «цветности» увеличивается.

3. *Заключительная* стадия, при которой градиенты внезапно и спонтанно исчезают и жидкость принимает однородный «кофейный» цвет.

Сравнительно большая длительность первой стадии связана с медленностью процесса диффузии или теплопроводности (горячий кофе и холодные сливки). В третьей стадии исчезновение градиентов обусловлено преимущественно молекулярной диффузией, подготовленной на второй стадии. Эккерт предложил классифицировать физический процесс перемешивания по признаку учёта диффузии. Для процессов, когда диффузией можно пренебречь (например, для непродолжительных процессов по сравнению с типичным временем диффузии для заданных жидкостей) он предложил термин «механическое смешивание (взбалтывание)» (*stirring*), в отличие от «молекулярного перемешивания» (*mixing*) с учетом процесса диффузии. Все наше дальнейшее изложение будет относиться именно к анализу первого процесса.

Изучение дистрибутивного механического смешивания основано на описании траекторий индивидуальных частиц окрашенной области. Использование слова «частица» в этом контексте удобно, но требует некоторого объяснения, так как исследуется движение математической точки \mathbf{X} , которая движется со скоростью, равной скорости жидкости $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$ в точке \mathbf{x} в данный момент времени t . Таким образом, предполагается, что окрашенная частица является безинерционной, не подвержена диффузии и никаким напряжениям на границе раздела смешиваемых жидкостей. Хотя идея такого подхода, связанная с различием в эйлеровом и лагранжевом описаниях потока жидкости, была предложена ещё Максвеллом [49] и развита позднее в работах [59, 69], до недавнего времени сравнительно немного было сделано, чтобы применить эти концепции в анализе смешивания жидкостей. Именно применение этих концепций привели к открытию качественно новых эффектов в динамике жидкости, когда сравнительно простое поле скоростей (эйлерово описание) способно привести к сложному поведению индивидуальных частиц (лагранжево описание). Такое явление было впервые детально изучено Арефом [14] и названо им хаотической адвекцией (см. также обзорные статьи [15, 17], в которых приведен обширный список последующих публикаций в этом направлении). Суть явления заключается в том, что движение индивидуальных частиц во многих случаях может быть неустойчивым. Это означает что две частицы, первоначально чрезвычайно близкие друг к другу, с течением времени могут оказаться сильно удаленными, что приводит к невозможности надежного предсказания положения частицы после определенного временного интервала, если задание её начального положения возможно только приближенно. Чтобы выделить данное свойство, Лайтхилл [46] ввел понятие «горизонт предсказуемости» как характерной особенности поведения нелинейных динамических систем. Стоит заметить, что для общего случая динамической системы уже Максвелл [50] в 1873 году указал на возможность существования условий неустойчивости. Обсуждение

важности понятий неустойчивости и непредсказуемости и их связь для общего случая систем с перемешиванием было проведено в фундаментальных работах Н. С. Крылова [6, 44]. Интуитивно ясно, что хаотическая адвекция приводит к более эффективному смешению при одинаковых энергетических затратах.

Спенсер и Вайли [75] развили наблюдение Рейнольдса [67] о медленном смешивании вязких жидкостей и предложили разделять два процесса в дистрибутивном механическом смешивании (т.е. без учета диффузии и химических реакций) нерастворимых друг в друге жидкостей. Первый процесс заключается в увеличении граничной поверхности между пятном окрашенной жидкости и окружающей жидкостью при растяжении и деформировании пятна. Второй процесс заключается в перераспределении этой границы при её изгибании повсюду во всем миксере. При этом, в силу сохранения объема пятна, увеличение граничной поверхности раздела ведет к уменьшению толщины растянутых элементов цветного пятна во всей области. Яркая демонстрация последовательных этапов двумерной деформации первоначально квадратной подкрашенной пленки из бутанола на поверхности воды в прямоугольном сосуде при двумерном движении приведена в классической статье Веландера [82]. Отметим, что несмотря на сложный характер деформирования пятна, связанный с растяжением и складкообразованием границы (Веландер даже указывает на хаотическое конечное состояние), топологические свойства области (односвязность и ориентация — область пятна всегда остается слева при обходе границы в направлении против часовой стрелки) полностью сохраняются. Процесс смешивания обычно продолжается пока толщина в среднем не становится достаточно малой относительно масштаба, в котором смесь должна быть оценена [58]. Так, например, если в качестве меры однородности по цвету служит зрительное впечатление, то толщина цветных полосок не должна превышать разрешающей способности глаза — 0.025 мм.

Однако несмотря на большое количество работ, проблема оптимизации смешивания, (то есть вопрос, где следует изначально расположить пятно, чтобы получить наиболее однородную смесь во всем объеме при заданных затратах энергии) по-прежнему, остаётся больше эмпирическим искусством, чем законченной научной теорией. Цель смешивания состоит в том, чтобы достичь однородного распределения компоненты добавки внутри основного компонента. Главный практический вопрос, однако, заключается не в том, будет ли система при бесконечной длительности процесса приближаться к этому однородному распределению, а в том, насколько в любой момент времени полученная смесь отличается от однородного, то есть идеально перемешанного, состояния. Для ответа на этот вопрос необходимо иметь критерий, который бы указывал на отклонение системы от однородного состояния. Полученные смеси могут быть «хорошими» или «плохими», но описание этих, зачастую субъективных, характеристик требует введения количественных критериев для степени смешения. В основополагающей статье Данквертс [26] ввел понятие «качества перемешивания» (*goodness of mixing*) при учете текущих химических реакций и процесса диффузии и определил два критерия: «шкалы сегрегации» (*scale of segregation*) и «интенсивности сегрегации» (*intensity of segregation*), которые важны и для оценки качества смешивания. Шкала сегрегации характеризует размер несмешанных частей компонент смеси, в то время как интенсивность характеризует разность между характеристиками индивидуальных составляющих смеси и желаемой средней характеристикой смеси.

Большинство природных и лабораторных процессов смешивания двух одинаковых по плотности и вязкости жидкостей, отличающихся только цветом, являются (квази) двумерными. Для несжимаемых жидкостей траектории движения индивидуальных частиц описывается одномерной гамильтоновой системой

$$\frac{dx}{dt} = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad \frac{dy}{dt} = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}, \quad (1.1)$$

(с функцией тока $\Psi(x, y, t)$ в качестве гамильтониана) при различных начальных условиях расположения частиц. Это обстоятельство было отмечено еще Гиббсом [35], который при изучении поведения ансамблей в фазовом пространстве, стремящихся к статистическому однородному равновесию, рассмотрел аналог этого процесса в терминах двухмерного механического смешивания цветной жидкости в бесцветной. При этом цветная жидкость не отличается по гидродинамическим свойствам от бесцветной и площадь цветной жидкости сохраняется при любых течениях. Гиббс рассмотрел (теперь уже классический) пример двух жидкостей, черной и белой, в круге, причем в начальный момент черная жидкость представляет собой пятно в виде сектора в 90° , то есть отношение площадей черной и белой жидкостей составляет 1:3. Гиббс исследовал такое течение в жидкости, которое соответствует постоянному во времени растягиванию пятна черной жидкости, например, при равномерно вращающейся границе круга. Гиббс отметил, что интеграл по всей области круга от плотности «цвета» (равной либо 0, либо 1 в любой точке круга) останется неизменной, независимой от процесса деформирования пятна, величиной, равной отношению площади цветной жидкости к общей площади области. Аналогичное сохранение имеет место и для интеграла от квадрата плотности «цвета» (так называемой, квадратичной плотности). С другой стороны, если выбрать и зафиксировать размер маленьких квадратики, на которые мысленно разбить всю круговую область и внутри которых определять модифицированную плотность «цвета» как отношение площади цветной жидкости к площади квадратика в каждом из них и продолжать деформирование неопределенно долго, то интеграл от квадрата такой плотности будет уменьшаться и стремиться к минимальной величине, соответствующей состоянию однородной смеси, а именно квадрату отношения площади цветной жидкости к общей площади круга. Гиббс строго отличал порядок пределов при вычислениях: сначала фиксируется размер квадратиков, затем продолжительность процесса смешивания устремляется к бесконечности. В этом случае суммарная квадратичная плотность изменяется в процессе, устремляясь к своему минимуму, несмотря на то, насколько мал выбранный размер квадратиков. Если же сначала зафиксировать конечную продолжительность процесса смешивания и затем устремлять площадь квадратиков к нулю, то совокупная квадратичная плотность будет инвариантной во времени и служить мерой отклонения смеси от однородного состояния не может. Гиббс на этом примере показал, что правильно выбрать меру или критерий отклонения системы от однородного состояния равновесия далеко не очевидное действие, даже, если заранее известно, что система стремиться к однородному состоянию с течением времени. Чтобы более четко зафиксировать различие понятий и процедур вычисления плотностей (тем самым указать порядок вычисления пределов), Эренфесты [30, 31] ввели термины «тонкая» плотность для плотности, вычисленной в точке и «грубая» плотность для плотности, определяемой в выбранных квадратах. Аналогичный подход был очерчен Веландером [82] (со ссылкой на Гиббса [35]) и использован применительно к двумерной задаче о движении завихренности в идеальной (невязкой) жидкости.

Существует также упрощенный традиционный подход [41, 47] к анализу качества двумерного смешивания, который основывается на представлении пятна как совокупность N точек-частиц, однородно распределенных по всей площади пятна S_b . Каждой точке условно приписывается «площадь» S_b/N и производится слежение во времени за каждой точкой в отдельности. Фактически подход с использованием однородно распределенных точек не обеспечивает правильное описание деформации пятна при наличии существенных растяжений и изгибов, если толщина нитей (в результате растяжения пятна) становится меньше, чем $(S_b/N)^{1/2}$, или, если длина линии контура становится больше, чем $2(NS_b)^{1/2}$. Кроме того, распределенные однородно в начальный момент точки могут распределяться неоднородно (что и происходит при хаотической адвекции) и, иногда, собираться в плотные группы. Любые вычисления площади, занимаемой пятном в процессе смешивания и основанные на сохранении меры Лебега, то есть

количества N точек, может обеспечивать только грубое качественное сходство картины смешивания при наличии существенных количественных ошибок. Для продолжительных процессов смешивания многие детали общей картины остаются невыясненными. Например, вопрос о том, означает ли «пустое» место, окруженное группой точек, действительное отсутствие там подкрашенной жидкости, оказывается без ответа. В статье будет показано, что ошибки счета на основе традиционного подхода, могут доходить до 35 %.

Наш анализ дистрибутивного смешивания основан на сохранении топологических свойств (связность и ориентация) граничного контура пятна, при его деформации в известном эйлеровом поле скорости. Ключевая идея нашего подхода заключается в использовании неоднородного распределения точек в описании начального контура, чтобы представлять этот контур таким образом, что, во-первых, расстояния между соседними точками всегда остаются между некоторыми заданными величинами (то есть, дополнительные точки добавляются, когда расстояние становится слишком большим, и точки удаляются, когда оно становится слишком малым); и, во-вторых, угол между любыми двумя соседними отрезками, соединяющими три соседние точки, больше, чем некоторая заданная величина (чтобы описать резкие изгибы линии). Основное преимущество такого подхода состоит в том, что обеспечивается сохранение площади пятна, ограниченного контуром, даже после довольно сложных деформаций растяжения и изгиба.

В данной статье предлагается методология исследования процесса дистрибутивного ламинарного механического смешивания двух одинаковых по плотности и вязкости жидкостей, отличающихся только цветом. Мы следуем подходу Гиббса и будем использовать «грубую» плотность распределения как основную меру для построения трех критериев качества смеси: среднеквадратичной плотности (Гиббс [35] – Веландер [82]), энтропии (Гиббс [35]) и интенсивности сегрегации (Данквертс [26]). Все три критерия показывают динамику смешивания в их собственных масштабах, поскольку перемешивание не является само по себе термодинамическим процессом, автоматически текущим к равновесному однородному состоянию [21]. Используя любой из этих критериев мы можем для выбранного размера квадратиков определить время, необходимое для процесса смешивания, чтобы достичь однородного, оцениваемого в выбранном масштабе рассмотрения, состояния. Чем больше размер квадрата, тем быстрее это желаемое «однородного» смешанное состояние достигается. Эти три критерия не являются независимыми и являются статистическими мерами первого порядка [80]. Для более полного описания качества смеси, мы будем также использовать такую меру как масштаб сегрегации [26], который является статистической мерой второго порядка. Масштаб сегрегации представляет средний размер сплошных пятен смешиваемого компонента.

Полученные знания могут служить первым шагом в исследовании смешивания в различных технологических процессах. Характерная особенность многих типичных течений в промышленных миксерах заключается в том, что они являются очень медленными (ползущими) с существенным преобладанием сил вязкости над инерционными силами. Такие течения с малыми числами Рейнольдса в ограниченной области, вызываемые движениями её границы, могут в первом приближении описываться линейными уравнениями Стокса. Знание двумерного поля эйлеровой скорости жидкости в этом приближении для канонических геометрий области может быть получено из строгого аналитического решения соответствующих линейных граничных задач [42, 52].

Когда движение границ полости является периодическим во времени, поле скоростей внутри её тоже будет периодическим. Изучение движений частицы в периодически заданном скоростном поле может быть сведено к изучению поведения в дискретном времени посредством анализа серии положений выбранной одной точки, полученных стробоскопически через каждый период времени. Такой подход сводит изучение динамической системы во времени к изучению последовательности дискретных отображений точек на плоскости (так называемых отображений Пуан-

каре [9]), но все же сохраняет существенные закономерности процесса. Фиксированная неподвижная точка такого сечения соответствует замкнутой периодической траектории рассматриваемой частицы, в которую точка возвращается после одного, двух, или более полных периодов. Точка на такой периодической траектории в начальный момент времени называется периодической точкой. Поэтому важной задачей является отыскание всех таких периодических точек. Если заданное поле скоростей обладает некоторой пространственной симметрией в рассматриваемой области, то для отыскания положений периодических точек можно применить метод, разработанный для задач смешивания в работах [4, 54, 43], как существенная модификация подхода, предложенного в работах [34, 33]. Кроме определения позиций каждой периодической точки важным шагом исследования является классификация их типов (эллиптический, параболический или гиперболический), изучая линеаризованные динамической системы в непосредственной близости каждой точки [7]. Такая методика определения типа периодических точек подобна классификации неподвижных точек в поле скоростей установившегося течения, впервые предложенной Н. Е. Жуковским в магистерской диссертации [3]. В данной работе будет показано, как знание месторасположений и типов периодических точек позволяет определить оптимальные режимы смешивания и возможность идентифицировать когерентные структуры в полученных смесях [53].

Данная методология двумерного «кинематического смешивания» основывается на знании эйлерового поля скорости течения в области и включает в себя разработку общих критериев оценки качества смешивания (раздел 2), создания численного алгоритма для определения положения контура границы смешиваемых жидкостей в заданные моменты времени (раздел 3), опробование ее на классическом примере смешивания Гиббса (раздел 4), и расширение данной методологии на случай периодических течений Стокса в клиновидной кольцевой полости (раздел 5), для чего были применены методы обнаружения и классификации периодических точек.

2. Критерии оценки качества смешивания

Этот раздел посвящен теории оценки качества дистрибутивного смешивания, основанной на таких понятиях, как «грубая» и «тонкая» плотность, энтропия, общепринятых в статистической физике, а также масштаб и интенсивность сегрегации, введенных специально в теории смешивания.

Исследование ламинарного механического смешивания основано на анализе деформирования полем течения закрашенной области пятна и основано на знании о положении границы пятна по всей полости в каждый момент времени. Цель анализа процесса смешивания заключается в ответе на простой вопрос: когда следует остановить процесс смешивания (весьма энергоёмкий для реальных миксеров) и считать, что полученная смесь является достаточно хорошо перемешанной. Таким образом, необходимо получить критериальную функцию, значение которой характеризовало бы весь процесс в среднем по всей полости, т.е. статистически.

Для наглядности изложения методологии оценки качества смеси рассмотрим модельную двумерную задачу о дистрибутивном смешивании. Пусть процесс смешивания происходит в квадратной полости площадью S , в центре которой в начальный момент времени расположено квадратное черное пятно площадью S_b (рис. 1). Покроем мысленно полость, в которой организован процесс смешивания, сеткой, состоящей из квадратных ячеек со стороной δ и площадью $S_\delta = \delta^2$ каждая. Пусть N_δ будет число ячеек, полностью покрывающих полость и тогда площадь полости может быть выражена как $S = N_\delta S_\delta$. На рис. 1 показано покрытие квадратной области со стороной в 32 выбранных единиц длины и площадью $S = 1024$ и содержащей в центре пятно

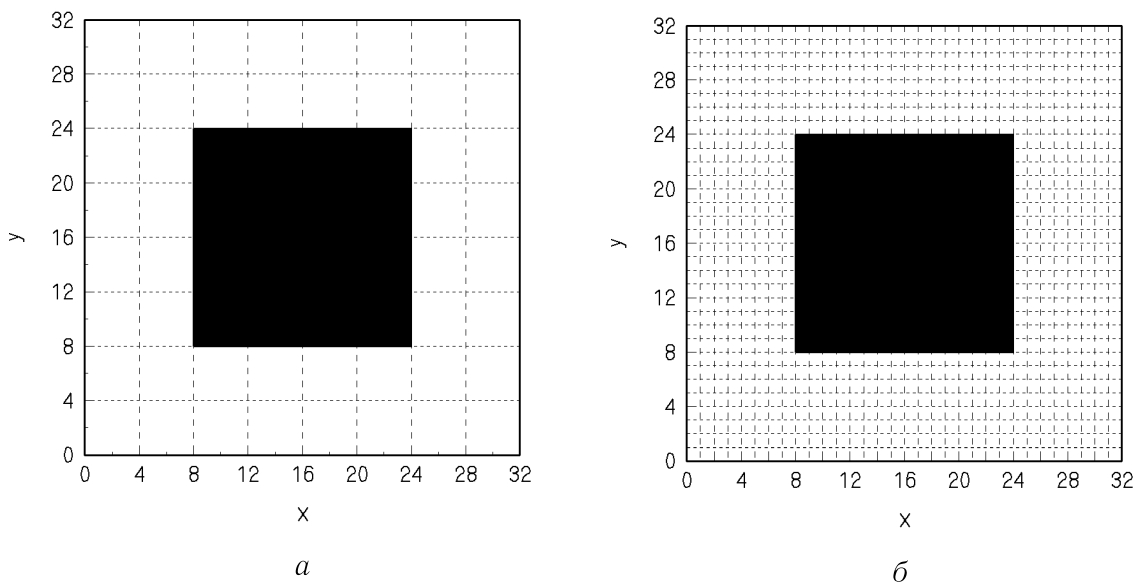


Рис. 1. Квадратная полость с пятном в центре: а — покрытие ячейками с $\delta = 4$, б — покрытие ячейками с $\delta = 1$.

в виде квадрата со стороной 16 единиц и площадью $S_b = 256$, двумя видами ячеек, со сторонами $\delta = 4$ и $\delta = 1$. В первом случае $S_\delta = 16$, $N_\delta = 64$, а во втором — $S_\delta = 1$, $N_\delta = 1024$.

Мы рассматриваем процесс дистрибутивного смешивания при отсутствии диффузии, когда площадь окрашенной жидкости S_b должна сохраняться, несмотря на существенное деформирование формы пятна в поле течения. Сохранение закрашенной материальной площади, ограниченной линией контура, позволяет ввести функцию распределения вероятности наличия окрашенного материала внутри ячейки с номером n как величину, пропорциональную площади $S_b^{(n)}$, занятой окрашенной жидкостью в этой ячейке. Отношение $D_n = S_b^{(n)} / S_\delta$, может быть названо плотностью вероятности (то есть плотностью распределения). Так определенная плотность вероятности D_n была впервые использована Гиббсом [35] и названа Эренфестами [30, 31] «грубой» плотностью. На рисунке 1, $D_n = 1$ для всех ячеек в центре полости и $D_n = 0$ для всех ячеек вне центра.

Гиббс указал, что для бесконечно малой величины δ величина D_n всегда принимает лишь одно из двух значений, а именно, 0 или 1. В случае малой, но конечной, величины δ в процессе смешивания величина D_n изменяется, принимая значения в интервале $0 \leq D_n \leq 1$. Если мы интересуемся средней плотностью окрашенной жидкости $\langle D \rangle$ (здесь и далее угловые скобки обозначают усреднение по всем ячейкам площади полости), т.е. вычисляем сумму

$$\langle D \rangle = \frac{1}{N_\delta} \sum_{n=1}^{N_\delta} D_n = \frac{1}{N_\delta S_\delta} \sum_{n=1}^{N_\delta} S_b^{(n)} = \frac{S_b}{S}, \quad (2.1)$$

то получаем постоянную, равную отношению площади окрашенной жидкости S_b к всей площади полости S . Ясно, эта величина не изменяется в процессе смешивания и равна средней плотности $\langle D \rangle_0$ в начальный момент.

Однако, если мы рассматриваем *квадратичную* плотность, определенную как $D_n^2 = (S_b^{(n)}/S_\delta)^2$ и осредняем эту величину по всем ячейкам (т.е. вычисляем *среднеквадратичную* плотность $\langle D^2 \rangle$), то получаем неравенство

$$\langle D^2 \rangle = \frac{1}{N_\delta} \sum_{n=1}^{N_\delta} D_n^2 = \frac{1}{S} \sum_{n=1}^{N_\delta} D_n S_b^{(n)} < \frac{S_b}{S}. \quad (2.2)$$

Такое неравенство обусловлено тем, что в каких-то ячейках обязательно будет $D_n < 1$. Ясно, что лишь в начальный момент *среднеквадратичная* плотность $\langle D^2 \rangle_0 = S_b/S$.

Идеально полное смешивание (теоретически достигаемое лишь за *бесконечное* время) характеризуется тем, что $D_n = S_b/S$ во *всех* N_δ ячейках при любой *конечной* величине δ . При этом, $\langle D \rangle_\infty = S_b/S$ и $\langle D^2 \rangle_\infty = (S_b/S)^2 = \langle D \rangle^2$. Открытие того обстоятельства, что *среднеквадратичная* плотность $\langle D^2 \rangle$ не является постоянной в процессе смешивания и *монотонно убывает* (как полагал Гиббс) от известного значения S_b/S до минимального известного значения $(S_b/S)^2$ и что свойство перемешивания обнаруживается только, если сначала выполняется усреднение по ячейкам, и составляет основной результат знаменитой Главы XII «О движении систем и ансамблей систем в течении больших промежутков времени» книги [35]. Эта мысль Гиббса была впоследствии подробно разъяснена Эренфестами [30, 31] и Веландером [82]

Таким образом, если процесс перемешивания ведет к однородной смеси, то величина $\langle (D - \langle D \rangle)^2 \rangle$ стремится к нулю, поскольку

$$\langle (D - \langle D \rangle)^2 \rangle = \langle D^2 - 2D\langle D \rangle + \langle D \rangle^2 \rangle = \langle D^2 \rangle - \langle D \rangle^2 \rightarrow 0. \quad (2.3)$$

Скорость уменьшения этой величины, которую можно выбрать за критерий оценки перемешивания, зависит от размеров ячеек, по которым ведется осреднение.

Рассмотрим поведение $\langle D^2 \rangle$ на конкретном примере. Пусть процесс дистрибутивного смешивания чёрного пятна, показанного на рис. 1, происходит таким образом, что в какой-то момент времени картина смешивания такова, как представлено на рис. 2. В первом виде ячеек с $\delta = 4$, показанных на рис. 2(а), каждая из ячеек, содержащих чёрную краску, заполнена либо наполовину, т.е. $D_n = 1/2$, либо на три четверти, т.е. $D_n = 3/4$. В этом случае согласно формулам (2.1), (2.2) и из рис. 2(а) следует, что

$$\langle D \rangle = \frac{1}{64} \left(\frac{1}{2} \cdot 26 + \frac{3}{4} \cdot 4 \right) = 0,25, \quad \langle D^2 \rangle = \frac{1}{64} \left(\frac{1}{2}^2 \cdot 26 + \frac{3}{4}^2 \cdot 4 \right) = 0,137.$$

На рис. 2(б) при ячейках с $\delta = 1$ все чёрные ячейки заполнены полностью, $D_n = 1$, и легко подсчитать, что

$$\langle D \rangle = 0,25, \quad \langle D^2 \rangle = 0,25.$$

Пусть в течении процесса смешивания чёрные области истончаются больше, и картина смеси показана на рис. 3. Для $\delta = 4$ из рисунка рис. 3(а) следует

$$\begin{aligned} \langle D \rangle &= \frac{1}{64} \left(\frac{1}{4} \cdot 46 + \frac{7}{16} \cdot 10 + \frac{1}{8} \cdot 1 \right) = 0,25, \\ \langle D^2 \rangle &= \frac{1}{64} \left(\frac{1}{4}^2 \cdot 46 + \frac{7}{16}^2 \cdot 10 + \frac{1}{8}^2 \cdot 1 \right) = 0,075. \end{aligned}$$

Для ячеек с $\delta = 1$, картина смеси представлена на рис. 3(б), где заполнение черным 256 ячеек полное, $D_n = 1$ и, следовательно

$$\langle D \rangle = \frac{1}{1024} \cdot 256 = 0,25, \quad \langle D^2 \rangle = \frac{1}{1024} \cdot 256 = 0,25.$$

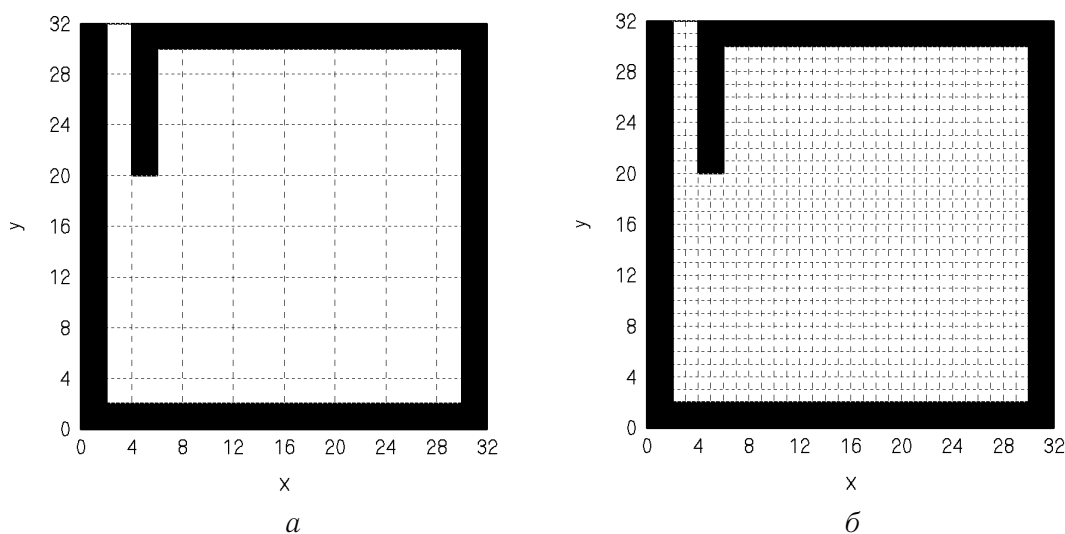


Рис. 2. Промежуточная картина смеси: *а* — покрытие ячейками с $\delta = 4$, *б* — покрытие ячейками с $\delta = 1$.

Таким образом, в ячейках с масштабом $\delta = 4$ $\langle D^2 \rangle$ уменьшается с истончением чёрной области, а в масштабе $\delta = 1$, занимая в данные моменты ячейку полностью, — нет.

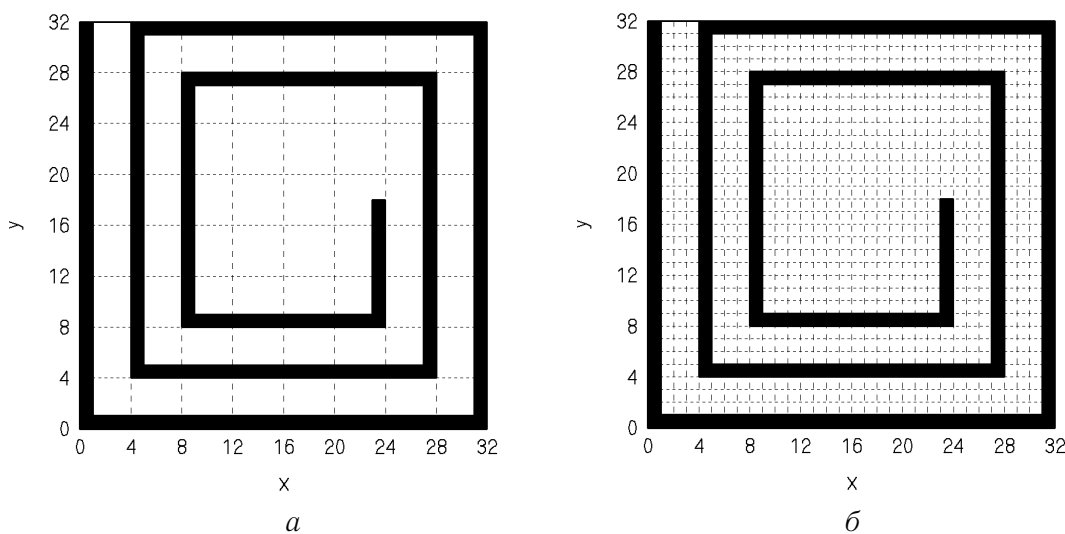


Рис. 3. Картина смеси: *а* — покрытие ячейками с $\delta = 4$, *б* — покрытие ячейками с $\delta = 1$.

Этот модельный пример показывает, что величина статистической (или, другими словами, осредненной) квадратичной плотности $\langle D^2 \rangle$ будет уменьшаться во времени, если окрашенный материал будет распространяться по увеличивающемуся числу ячеек. Чем в большем числе ячеек будет присутствовать окрашенная жидкость, тем меньше «грубая» плотность почти в каждой ячейке (так как закрашивание какой-то части новой ячейки k , на величину $S_b^{(k)}$, означает, в силу сохранения общей площади, уменьшение закрашенной площади $S_b^{(m)}$ хотя бы в одной ячейке).

ке m). Величина D_n представляет «грубая» плотность окрашенной жидкости, которая отличается от «тонкой» плотности f_d в бесконечно малом элементе площади dS_f , сторона которого всегда меньше ширины любого элемента окрашенной области. Другими словами, dS_f всегда настолько мал, что целиком расположен внутри окрашенной жидкости или неокрашенной. Тогда f_d равно единице, если соответствующий элемент dS_f находится в окрашенной области, и f_d равняется нулю, если вне области. Поведение f_d аналогично динамике D_n на рис. 1(б), 2(б), 3(б) (т. е. либо 0, либо 1). Имеется также различие и в самой процедуре получения статистических (осредненных) величин. Получение статистических величин с использованием «грубой» плотности D_n означает суммирование по всей полости (так называемый «подсчет по ячейкам») и деление суммы на число ячеек N_δ . Для определения осредненных в «тонкой» плотности величин необходимо применить процедуру интегрирования по dS_f , когда $\lim dS_f \rightarrow 0$.

В качестве критерия оценки качества смеси также можно использовать аналог энтропии, рассматривая вместо D_n^2 в каждой ячейке как статистическую меру величину $-D_n \log D_n$. Если окрашенный материал занимает ячейку полностью или полностью отсутствует, то величина $-D_n \log D_n$ равняется нулю. Значение энтропии изменяется только в тех ячейках, где $0 < D_n < 1$. Поскольку при этом значение $-\log D_n$ всегда положительно, то чем больше ячеек охватывает окрашенный материал, не полностью их покрывая, тем больше сумма $-\sum_{n=1}^{N_\delta} D_n \log D_n$. Таким образом, для хорошего процесса смешивания, энтропия смеси должна расти к своему максимуму

$$e = -\langle D \log D \rangle \rightarrow -\langle D \rangle \log \langle D \rangle. \quad (2.4)$$

Критерий энтропии не независим от критерия, построенного на квадратичной плотности, поскольку оба они используют меры статистики первого порядка (один элемент площади в каждый момент времени).

Данквертс [26] построил ещё две функции, которые являются полезными в оценке качества смешивания: *масштаб сегрегации* L_C и *интенсивность сегрегации* I_C . Масштаб сегрегации определяет средний размер сплошных пятен в смеси, в то время как интенсивность сегрегации показывает насколько значительно в среднем различие в композиции по всей области смешивания.

Для интенсивности сегрегации процесса перемешивания с химическими реакциями и диффузией он ввел формулу

$$I_C = \frac{1}{\langle C \rangle (1 - \langle C \rangle) S} \int_S (C - \langle C \rangle)^2 dS = \frac{\langle (C - \langle C \rangle)^2 \rangle}{\langle C \rangle (1 - \langle C \rangle)}, \quad (2.5)$$

где C — локальная концентрация, которая по определению Гиббса и Веландера равняется «тонкой» плотности f_d . Легко проверить что для дистрибутивного смешивания всегда (независимо от качества смеси) «тонкая» плотность удовлетворяет соотношению $\langle (f_d - \langle f_d \rangle)^2 \rangle = \langle f_d \rangle - \langle f_d \rangle^2$, поэтому I_C тождественно равняется единице. Следовательно, для смешивания без диффузии и химических реакций (для учета которых и была введена интенсивность) интенсивность сегрегации I_C не уменьшается, а равняется постоянной начальной величине и быть мерой качества не может.

Поэтому, нами впервые была предложена модификация формулы интенсивности сегрегации [43], применимая к оценке свойств дистрибутивного механического смешивания без диффузии. Для чего соотношение с квадратичной плотностью (2.3), которое является чувствительным к качеству механического перемешивания, приводим к безразмерному виду, поделив его

на $\langle D \rangle(1 - \langle D \rangle)$. Тогда модифицированная интенсивность сегрегации имеет вид

$$I = \frac{\langle (D - \langle D \rangle)^2 \rangle}{\langle D \rangle(1 - \langle D \rangle)}. \quad (2.6)$$

Для хорошего смешивания величина $\langle (D - \langle D \rangle)^2 \rangle$ стремится к нулю, что означает, что I также имеет тенденцию уменьшения к нулю.

Наше определение I отличается от подобной меры смешивания I_O , использованной Отти-но [60], который ввел соотношение

$$I_O^2 = \frac{\langle (D - \langle D \rangle)^2 \rangle}{\langle D \rangle^2}, \quad (2.7)$$

Представляющее собой нормированный критерий среднеквадратичной плотности 2.3.

Отметим также, что при традиционном подходе к изучению перемешивания с использованием анализа движения N равномерно распределенных несвязанных точек для использования «грубой» плотности в I (2.6) необходимо сделать дополнительное предположение. Это предположение приписывает каждой точке не изменяемую при смешивании площадь окрашенной жидкости S_b/N и приводит к ошибкам при вычислениях.

Масштаб сегрегации L_C был определен Данквертсом [26] с помощью корреляционной функции

$$K_C(\boldsymbol{\eta}) = \langle (C_1 - \langle C \rangle)(C_2 - \langle C \rangle) \rangle, \quad (2.8)$$

которая показывает как флуктуации концентрации $C - \langle C \rangle$ в точках 1 и 2, разделенных вектором $\boldsymbol{\eta} = \eta \mathbf{e}_\eta$, отличаются друг от друга. Нормированная корреляционная функция называется корреляционным коэффициентом

$$\rho_C(\boldsymbol{\eta}) = \frac{\langle (C_1 - \langle C \rangle)(C_2 - \langle C \rangle) \rangle}{\langle (C - \langle C \rangle)^2 \rangle}. \quad (2.9)$$

Очевидно, что $\rho(\mathbf{0}) = 1$. Когда η превышает некоторое значение, соответствие между концентрациями в точках могут стать случайной величиной, и тогда $K_C(\boldsymbol{\eta})$ стремится к нулю. Если смесь состоит из пятен, величина η , при которой $K_C(\boldsymbol{\eta})$ (2.8) является равным нулю (скажем, $\eta = \xi$) соответствует среднему размеру пятен в направлении \mathbf{e}_η . Более точно, средний радиус пятен в направлении \mathbf{e}_η равен

$$L_C(\mathbf{e}_\eta) = \int_0^\xi \rho_C(\boldsymbol{\eta}) d\eta. \quad (2.10)$$

Рисунки смесей, которые мы собираемся обсуждать, не состоят из случайно распределенных пятен, а имеют непрерывную слоистую структуру (см. рисунок 5 (а)). Однако, использование «грубой» плотности (что необходимо для применения критериев качества) в представлении смесей создает такую ячеистую структуру, которая может напоминать разбросанные пятна краски разной плотности (см. рисунки 5 (б, в)). Допустим, мы закрасим те ячейки, для которых плотность D_n больше, чем $\langle D \rangle$ черной краской; ячейки, где D_n равняется $\langle D \rangle$ серой; а ячейки, где $0 \leq D_n < \langle D \rangle$ белой, тогда такое представление можно рассматривать как пятнистое с белыми, черными и серыми квадратными пятнами. Кроме того, в «грубоплотностном» представлении функция корреляции, определенная как

$$K(\boldsymbol{\eta}) = \langle (D^{(1)} - \langle D \rangle)(D^{(2)} - \langle D \rangle) \rangle, \quad (2.11)$$

(где $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ соответствуют «грубой» плотности в ячейках 1 и 2, отделенных друг от друга вектором $\boldsymbol{\eta}$) дает важную информацию относительно структуры смеси и позволяет подробно

исследовать регулярность в интервале $(0, \xi)$, когда $(K > 0)$. Такая регулярность означает что, в среднем, в двух ячейках на расстоянии $\eta < \xi$ величины $D_n - \langle D \rangle$ имеют тот же самый знак (то есть тот же самый цвет) и поэтому $K > 0$. При $\eta = \xi$ вариации этих величин станут некоррелированными и поэтому $K = 0$. Таким образом, расстояние $\eta = \xi$ в направлении e_η связано с усредненным размером одноцветного пятна в этом направлении, и величина

$$L(e_\eta) = \int_0^\xi \frac{\langle (D^{(1)} - \langle D \rangle)(D^{(2)} - \langle D \rangle) \rangle}{\langle (D - \langle D \rangle)^2 \rangle} d\eta \quad (2.12)$$

дает средний радиус пятна. Дополнительно к интенсивности сегрегации I , масштаб сегрегации L может использоваться как мера размеров пятен грубоплотностного описания смесей. Динамика таких масштабов должна отразить изменения размеров не перемешанных регионов, где D_n всегда больше, чем $\langle D \rangle$.

Таким образом, мы показали что, используя описанные меры качества смесей, мы можем проанализировать процесс смешивания в деталях, что будет продемонстрировано в последнем разделе статьи на конкретном примере.

3. Слежение за изменением контура

Рассмотренный в предыдущем разделе модельный пример имеет простое поведение границы пятна, что допускает вычисление мер в явном виде. Однако уже пример Веландера [82] показывает те вычислительные трудности, с которыми приходится иметь дело при использовании данной методологии. Они состоят, во-первых, в необходимости слежения за границей пятна, и, во-вторых, связаны с возможностью определения окрашенной площади $S_b^{(n)}$ в n -й квадратной ячейке.

Любой алгоритм слежения за изменением линии контура L сводится к определению положений точек, упорядоченно распределенных на начальном контуре, и последующим их соединением прямыми отрезками. Будучи очевидным и легким на начальной стадии, такой алгоритм становится затруднительным на последующих стадиях, сталкиваясь с общей проблемой: как соединять эти точки, чтобы получить границу пятна без пересечений. Вследствие неоднородного растяжения и складкообразования линии контура в разных областях внутри полости, две соседних в начальный момент точки могут оказаться довольно далеко от друг друга в будущем. Очевидный способ преодолеть эту проблему заключается в увеличении числа точек. Чтобы избежать ненужных вычислительных затрат, такое увеличение не должно проводиться равномерно по всему контуру, а только в тех частях начальной линии, где со временем происходит значительное растяжение или складкообразование. Именно такой принцип использует разработанный нами алгоритм. Сущность его заключается в следующем:

1. В начальный момент времени $t_0 = 0$ выбираем небольшое число точек N_0 (обычно, $N_0 = 25$), однородно распределенных по начальной линии контура, решаем систему уравнений адвекции (1.1) для каждой точки и определяем их позиции в момент $t_1 = \Delta t$.

2. Вычисляем расстояния Δl_n между точками с индексами n и $n + 1$ для $n = 1, \dots, N_0$. Если окажется, что некоторое расстояние Δl_k становится большим, чем некоторое принятое l_{dis} , то вставляем дополнительную точку на начальном контуре в середине между точками k и $k + 1$, решаем систему уравнений адвекции (1.1) для этой точки, и нумеруем заново соответственно начальное и заключительное множество точек. После завершения этой операции, мы имеем

$N_d \geq N_0$ точек с расстоянием между каждыми из двух соседних меньше, чем l_{dis} . Соединяем эти точки прямыми линиями, формируя N_d -угольник.

3. Определяем углы при каждой вершине этого многоугольника, т.е. для любых трёх точек $m-1, m, m+1$ вычисляем угол γ_m в вершине m соответствующего треугольника (в вычислительном отношении, предпочтительно вычислять только косинус этого угла по известным расстояниям между этими точками). Если угол γ_m , окажется меньше, чем некоторая заданная величина γ (обычно, $\gamma = 120^\circ$), также вставляются дополнительные точки на начальной линии контура посередине между точками $m-1, m$ и $m, m+1$ и все начальные и конечные точки нумеруются заново.

4. Для экономии времени счета, производится также удаление одной из двух очень близких соседних точек таким образом, чтобы расстояния между всеми новыми точками превышало величину l_{min} и все углы в многоугольнике были больше, чем γ .

Таким образом, начиная в $t_0 = 0$ с N_0 однородно распределенных по границе закрашенного пятна точек, в момент $t_1 = \Delta t$ мы имеем N_1 точек ($N_1 \geq N_0$), которые соединяем прямыми линиями, чтобы сформировать N_1 -угольник. Этот многоугольник представляет деформированную течением границу и имеет такие свойства, что расстояние l между любым двумя соседними точками заключено в интервале $l_{min} < l < l_{dis}$, и что угол при любой вершине не меньше, чем γ . Важно, что этот многоугольник образован из N_1 точек, *неоднородно* распределенных на начальном контуре. Следующий шаг состоит в переходе к моменту времени $t_2 = 2\Delta t$, для чего двигаем N_1 -угольник и применяем снова тот же самый алгоритм.

Предложенный алгоритм имеет главное преимущество, что все заключительные позиции точек имеют их стартовые положения на первоначальном контуре. Это свойство обычно теряется, когда используются сплайн-методы, «приглаживающие» линию и перераспределяющие точки.

Численное интегрирование системы уравнений адвекции (1.1) на интервале времени Δt выполнялось с помощью двух схем. Первая схема — стандартный метод Рунге-Кутты четвертого порядка для интегрирования систем обыкновенных дифференциальных уравнений [65, гл. 16] с постоянным шагом. Вторая схема — это метод Рунге-Кутты-Фелберга с адаптивным шагом [38]. Для всех исследованных нами протоколов перемешивания, обе схемы интегрирования дают практически одинаковые результаты. Важно заметить, что интегрирование обратно во времени обеспечивает возвращение всех точек в их начальные позиции на начальную границу пятна.

Дополнительная и важная проверка предложенного алгоритма заключается в выполнении точности условия сохранения площади области. Площадь области S , заключенной внутри деформированного контура L , аппроксимированного N -угольником, может быть вычислена по теореме Стокса

$$S = \iint_S dx dy = \frac{1}{2} \oint_L (-y dx + x dy) \approx \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (x_n y_{n+1} - y_n x_{n+1}), \quad (3.1)$$

с $x_{N+1} = x_1, y_{N+1} = y_1$. При этом величина $|S - S_0|$ должна не превышать $0.005 S_0$ (где S_0 — площадь пятна в начальный момент времени).

4. Классический пример Гиббса смешивания в жидкости

Рассмотрим процесс смешивания, описанный Гиббсом [35], применительно к объему между двумя цилиндрами при равномерном вращении внешнего цилиндра. Пусть закрашенная чёрная

жидкость занимает сектор в 90° . Сечение кольцевой области показано на рис. 4. Рассмотрим двумерное медленное течение несжимаемой вязкой жидкости в кольцевой полости между двумя цилиндрами безразмерных радиусов $r = a$ и $r = b$, вызванное тангенциальной постоянной во времени скоростью внешнего цилиндра V . При этом внутренний цилиндр остается неподвижным.

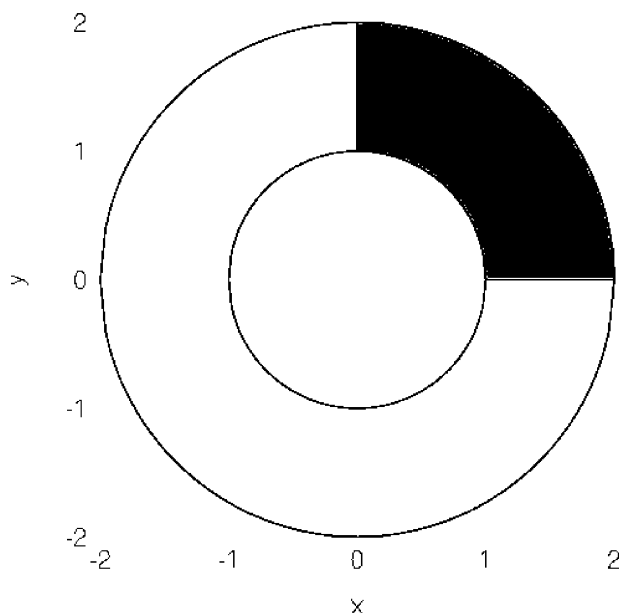


Рис. 4. Начальное распределение черной краски.

Решение уравнений движения Навье–Стокса вязкой несжимаемой жидкости для такой граничной задачи известно [10]

$$u_r = 0, \quad u_\theta = Ar + \frac{B}{r}, \quad A = \frac{Vb}{b^2 - a^2}, \quad B = -\frac{Va^2b}{b^2 - a^2}. \quad (4.1)$$

Система (1.1) может быть записана в прямоугольных координатах $x = r \sin \theta$, $y = r \cos \theta$:

$$\frac{dx}{dt} = -Ay - \frac{By}{x^2 + y^2}, \quad \frac{dy}{dt} = Ax + \frac{Bx}{x^2 + y^2}. \quad (4.2)$$

Для получения картин смесей будем следить за изменением линии контура, отделяющего чёрную жидкость от белой, используя описанный в разделе 3 алгоритм. Каждая точка контура движется согласно уравнений адвекции (4.2). А в начальный момент времени контур задается соотношениями $a \leq r \leq b$ при $\theta = 0$ (горизонтальная часть границы), $0 \leq \theta \leq \pi/2$ при $r = b$ (верхняя криволинейная часть границы), $b \geq r \geq a$ при $\theta = \pi/2$ (вертикальный участок границы), $\pi/2 \geq \theta \geq 0$ при $r = a$ (нижний криволинейный участок). При расчетах полагалось $a = 1$ и $b = 2$.

После того, как внешний цилиндр совершит 12 полных оборотов, картина смеси будет иметь вид, показанный на рис. 5 (а). Из рисунка видно, что чёрная жидкость распределена по всей кольцевой области. С течением времени чёрных «намоток» будет становиться все больше и

больше. При бесконечно долгом смешивании, когда число «намоток» будет бесконечно большим, смесь станет однородно серой.

Для оценки промежуточного состояния смеси, скажем, такого, как показано на рис. 5 (а), мы будем, следуя Гиббсу, использовать «грубую плотность» распределения как основную меру для построения таких двух критериев качества смеси, как: суммарной среднеквадратичной плотности (Гиббс [35]–Веландер [82]) и интенсивности сегрегации (Данквертс [26]). Эти два критерия показывают динамику перемешивания в их собственных масштабах и могут использоваться для описания динамики процесса, поскольку перемешивание не является само по себе термодинамическим процессом, автоматически текущим к равновесному однородному состоянию [21]. Используя любой из этих критериев, мы можем для выбранного размера квадрата («зерна») определить время, необходимое для процесса перемешивания, чтобы достичь однородного, оцениваемого в выбранном масштабе рассмотрения, состояния. Чем больше размер стороны квадрата, тем быстрее это желаемое смешанное состояние достигается. Так, на рис. 5 (б) показана рассматриваемая картина смеси, данная в «грубоплотностном» представлении (показано распределение D_n), когда размер «зерна» характеризуется $\delta = 0.2$. На рис. 5 (в) эта же смесь дана для случая $\delta = 0.1$. Таким образом, из сравнения рисунков видно, что для крупных «зёрен» с $\delta = 0.2$ смесь выглядит однородной по всему кольцу за исключением угловых зёрен. Для более мелких «зёрен» с $\delta = 0.1$ смесь в области кольца имеет даже пустые зёрна и процесс смешивания следует продолжить для получения однородного распределения. На рис. 6 приведены графики ди-

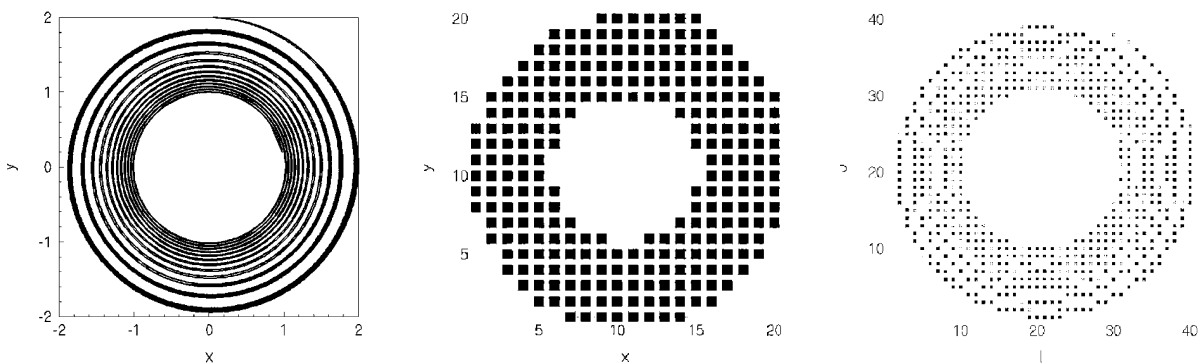


Рис. 5. Картина смеси после 12 оборотов: а — смесь, б — распределение «грубой плотности» с $\delta = 0.2$, в — распределение «грубой плотности» с $\delta = 0.1$.

намики критериев (5) от среднеквадратичной плотности, а именно функции вида $\langle D^2 \rangle / \langle D \rangle^2 - 1$, и интенсивности сегрегации I (9), вычисленные в «зёрнах» с $\delta = 0.1$, когда t/T показывает число полуоборотов вращения верхней границы. Из рисунка видно, что смесь становится с увеличением количества оборотов более однородной. Динамика обоих критериев похожа, приближаясь к нулю. Однако второй критерий, интенсивности сегрегации I (9), более удобен при анализе, так как изменяться может в заранее известных пределах: от 1 до нуля.

Следует отметить, что указанные выше два критерия не являются независимыми и являются статистическими мерами первого порядка [80]. Для более полного описания качества смеси, можно также использовать такую меру как масштаб сегрегации [26], который является статистической мерой второго порядка. Масштаб сегрегации представляет средний размер сплошных пятен перемешиваемого компонента.

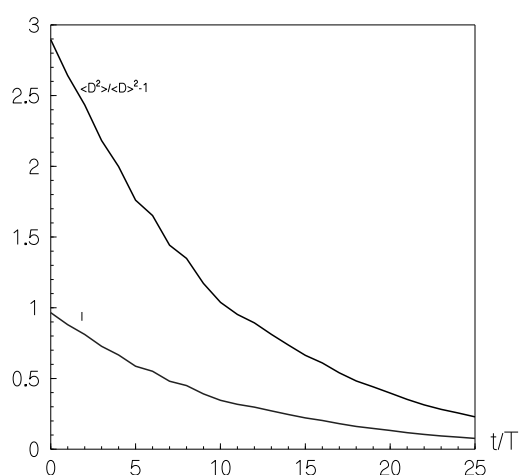


Рис. 6. Зависимость критериев $\langle D^2 \rangle / \langle D \rangle^2 - 1$ и I от числа полуоборотов.

5. Исследования периодического смешивания двух одинаковых по плотности и вязкости жидкостей

В данном разделе статьи излагаются дополнительные, к изложенным выше, аспекты методологии исследования дистрибутивного ламинарного механического смешивания двух одинаковых по плотности и вязкости жидкостей, применительно к периодическим процессам. В качестве базового объекта для представления данной методологии мы выбрали двумерное течение в полости в виде части кольца, ограниченной двумя радиусами, в которой движение жидкости задается попеременным касательным движением круговых границ, что в первом приближении моделирует один из возможных видов промышленных миксеров. Кроме того, такая геометрия весьма удобна для сравнительного экспериментального анализа процесса смешения для разных начальных положений пятна, при одинаковом протоколе движения границ. Следует особо подчеркнуть, что проблема механического смешивания, которое рассматривается в данной статье, отличается по существу от математических задач по изучению систем с перемешиванием (где традиционно рассматривается предельное поведение систем при стремлении времени к бесконечности) причем большей частью хаотических, обладающих положительной K -энтропией. Мы же ограничиваем рассмотрение *конечными* отрезками времени и главным образом интересуемся тем, как создать смешивание и где поместить пятно добавки (или пятна), чтобы достичь лучшего результата смешивания этого пятна за конечное время.

На рис. 7 для иллюстрации сказанного представлены четыре типичных картины смешивания начальных круглых пятен (показанных темными кругами) в кольцевой полости после периодического поочередного движения внутренней и внешней границ с равным совокупным перемещением обеих границ для каждой полости. При этом рассматривались различные протоколы смешивания, различные скорости и периоды движений границ каждой полости, но приложенная энергия, которая пропорциональна совокупному перемещению границ, одинакова для представленных картин смесей. Сравнение картин показывает, что, несмотря на равную потребленную энергию, результаты смешивания являются различными. Они существенно зависят от начального положения круглого пятна и протокола смешивания. Данный раздел статьи посвящен



Рис. 7. Четыре клиновидных полости со смесями, полученными при равной затраченной энергии на перемешивание начальных круглых пятен¹

объяснению причин получения различных результатов смешивания и их количественной оценке. Предлагаемая методология включает в себя выполнение следующих шагов в исследовании:

- (1) построение аналитического решения для поля скоростей;
- (2) определение положения контура границы смешиваемых жидкостей в заданные моменты времени;
- (3) нахождение периодических точек и инвариантных многообразий;
- (4) оценка качества смешивания в любой момент времени.

При этом, следуя предложенной методологии оценки качества смесей, мы будем использовать «грубую плотность» распределения как основную меру для построения трех критериев качества смеси: суммарной среднеквадратной плотности [82], энтропии [35] и интенсивности сегрегации [26]. Все три критерия показывают динамику перемешивания в их собственных масштабах и могут использоваться для описания динамики процесса. Используя любой из этих критериев мы можем для выбранного размера квадрата («зерна») определить время, необходимое для процесса перемешивания, чтобы достичь однородного (оцениваемого в выбранном масштабе рассмотрения) состояния. Как было показано в предыдущем разделе, чем больше размер стороны квадрата, тем быстрее это заданное однородное состояние достигается. Эти три критерия не являются независимыми и являются статистическими мерами первого порядка [80]. Для более полного описания качества смеси, мы будем также использовать такую меру как масштаб сегрегации [26], который является статистической мерой второго порядка. Масштаб сегрегации представляет средний размер сплошных пятен смешиваемого компонента.

Данный раздел имеет следующие подразделы: постановка проблемы смешивания в двумерной кольцевой клиновидной полости, далее представлены аналитическое выражение для поля скоростей, алгоритм поиска и классификация периодических точек, а также рассмотрение конкретного периодического протокола смешивания и анализ когерентных структур.

¹См. также электронную версию статьи на страничке журнала <http://ics.org.ru/journals/nd>, где этот и некоторые другие рисунки представлены в цветном формате. — Прим. ред.

5.1. Формулировка проблемы

Рассмотрим квазистационарное двумерное ползущее течение несжимаемой вязкой жидкости в кольцевой клинообразной полости, $a \leq r \leq b$, $|\theta| \leq \theta_0$ (рис. 8), вызванное тангенциальными периодически изменяющимися во времени скоростями $V_{bot}(t)$ и $V_{top}(t)$ на изогнутых нижней и верхней границах $r = a$ и $r = b$, соответственно. Части границы $a \leq r \leq b$, $|\theta| = \theta_0$ неподвижны.

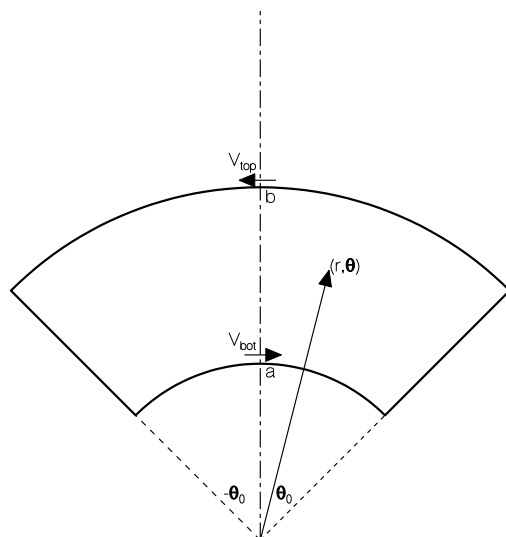


Рис. 8. Геометрия клиновидной секторной полости

При этом выбираем

$$\left. \begin{aligned} V_{bot}(t) &= \frac{2a\Theta}{T}, & V_{top}(t) &= 0, & \text{при } kT < t \leq \left(k + \frac{1}{2}\right)T, \\ V_{bot}(t) &= 0, & V_{top}(t) &= -\frac{2b\Theta}{T}, & \text{при } \left(k + \frac{1}{2}\right)T < t \leq (k+1)T, \end{aligned} \right\} \quad (5.1)$$

($k = 0, 1, 2, \dots$), то есть такой разрывный во времени протокол смешивания, когда в течении каждого полупериода $T/2$ жидкость в полости движется стационарно под действием стационарного движения нижней или верхней стенки на угол Θ по и против часовой стрелки, соответственно. Легко убедиться, что такой протокол реализуется экспериментально для полного кольца, состоящего из четырёх секторов, представленных на рис. 7.

Радиальную u_r и азимутальную u_θ компоненты скорости течения в полости можно выразить через функцию тока Ψ как

$$u_r = \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}, \quad u_\theta = -\frac{\partial \Psi}{\partial r}. \quad (5.2)$$

Для течений в приближении Стокса функция тока Ψ удовлетворяет бигармоническому уравнению

$$\nabla^2 \nabla^2 \Psi = 0 \quad (5.3)$$

(∇^2 — оператор Лапласа) с граничными условиями

$$\left. \begin{aligned} \Psi = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial r} = -V_{bot}, \quad \text{при } r = a, \quad |\theta| \leq \theta_0, \\ \Psi = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial r} = -V_{top}, \quad \text{при } r = b, \quad |\theta| \leq \theta_0, \\ \Psi = 0, \quad \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} = 0, \quad \text{при } a \leq r \leq b, \quad |\theta| = \theta_0. \end{aligned} \right\} \quad (5.4)$$

Поэтому для функции тока Ψ имеем классическую бигармоническую задачу с заданными значениями функции и ее нормальной производной на границе. Важно заметить, что нормальная производная (или, тангенциальная скорость u_θ) является разрывной функцией в угловых точках $(a, \pm\theta_0)$ и $(b, \pm\theta_0)$. Однако это обстоятельство не нарушает непрерывности поля скоростей внутри всей полости, и лишь вызывает некоторые трудности в вычислении с необходимой точностью скорости в окрестности этих точек.

Система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dr}{dt} = \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial \theta}, \quad \frac{d\theta}{dt} = -\frac{\partial \Psi}{\partial r} \quad (5.5)$$

с начальными условиями $r = r_{in}$, $\theta = \theta_{in}$ при $t = 0$ описывает движение пассивной лангранжевой частицы в известном эйлеровом поле скоростей. Система (5.5) может быть записана в гамильтоновой форме вида (1.1) в прямоугольных координатах $x = r \sin \theta$, $y = r \cos \theta$.

В пределах каждого из интервалов времени $(kT, kT + T/2)$, $(kT + T/2, kT + T)$, при $k = 0, 1, 2, \dots$, когда функция тока явно не зависит от времени, система (5.5) интегрируема и при этом существует ее первый интеграл $\Psi(r, \theta) = \text{const}$. Следовательно, частица (r_{in}, θ_{in}) движется по установившимся линиям тока в течение первой половины периода $(0, T/2)$. В момент $t = T/2$ топология линий тока мгновенно изменяется, и частица движется по новым линиям тока в течение второй половины периода $(T/2, T)$, и так далее. Пространственные положения частицы изменяются непрерывно, но ее скорость имеет разрыв значений в каждый момент времени $t_k = kT/2$.

Именно из-за этих периодических резких изменений поля скоростей возникает необходимость исследовать вопрос устойчивости и неустойчивости решения системы (5.5), как частного случая проблемы адвекции [14]. Устойчивость (по Ляпунову) невозмущенного движения означает следующее его свойство: всегда можно подобрать настолько малые возмущения начальных условий, чтобы возмущения координат не выходили из наперед поставленных границ *во все время движения*. Когда система такова, что незначительное различие начальных координат точек приводит только к малому изменению их положений с течением времени, то считают, что система обладает устойчивым решением. Если же малое различие в начальных положениях вызывает конечное расстояние между точками через конечное время, то считают, что система обладает неустойчивым решением. Вследствие разрывности поля скоростей система (5.5) может иметь неустойчивые решения, когда весьма близкие в начальный момент частицы за конечное время расходятся друг от друга на конечное расстояние, оказываясь даже в совершенно разных частях полости. Именно такая ситуация является предпочтительной в задачах перемешивания, когда стремятся создать такое поле скоростей и движение частиц, что близкие по начальному положению частицы (например, находящиеся в круглом пятне) с течением времени стремятся уйти друг от друга на значительные интервалы, покрыть область всюду и «забыть» свою близость в начале процесса перемешивания.

Проблема смешивания некоторого окрашенного количества жидкости (пятна), которое никак не влияет на поле скоростей в рассматриваемой области (так называемая пассивная примесь), состоит в прослеживании во времени за положением континуума частиц, первоначально расположенных внутри некоторой области, скажем, круга радиуса R с центром в (r_c, θ_c) . Мы полагаем, что течение обеспечивает только непрерывное деформирование первоначально связанного контура пятна. Поэтому, из топологических соображений следует, что о полученной картине смешивания пятна можно судить лишь по деформированному его контуру.

Проблема обнаружения периодических точек потока при использовании отображения Пуанкаре очевидно сводится к задаче поиска корней двух нелинейных уравнений на плоскости. Как известно [65], не существует хороших общих методов для определения корней нелинейных алгебраических уравнений. В рассматриваемой задаче перемешивания ситуация даже более сложная, так как положение любой точки после каждого отображения определяется системой дифференциальных уравнений. Следовательно, стандартный путь поиска периодических точек может требовать слишком большого объема вычислений и не всегда приводит к цели. Поэтому мы должны развить новый алгоритм нахождения всех таких точек, или по крайней мере точек низших порядков.

5.2. Методы

В этой части статьи мы остановимся на определении поля скоростей и на методике отыскания периодических точек.

Чтобы найти поле скоростей в клинообразной круговой области, применим метод суперпозиции к граничной задаче (5.3)–(5.4) и представим функцию тока как сумму двух бигармонических функций

$$\Psi = \Psi_1 + \Psi_2. \quad (5.6)$$

Эти бигармонические функции выбраны в форме рядов Фурье с достаточным функциональным произволом для выполнения граничных условий (5.4) при $r = a$, $r = b$ и при $|\theta| = \theta_0$, соответственно. Путь нахождения таких решений детально изложен в [42], здесь же мы представим лишь окончательные результаты. Ввиду определенной симметрии задачи по углу θ , функции Ψ_1 и Ψ_2 могут быть записаны как

$$\begin{aligned} \Psi_1 = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\alpha_m} \left\{ X_m \left[\left(\frac{a}{r} \right)^{\alpha_m} - \left(\frac{a}{r} \right)^{\alpha_m-2} + r_0^{\alpha_m-2} \left(\frac{r}{b} \right)^{\alpha_m+2} - r_0^{\alpha_m} \left(\frac{r}{b} \right)^{\alpha_m} \right] - \right. \\ \left. - Y_m \left[\left(\frac{r}{b} \right)^{\alpha_m+2} - \left(\frac{r}{b} \right)^{\alpha_m} + r_0^{\alpha_m} \left(\frac{a}{r} \right)^{\alpha_m} - r_0^{\alpha_m+2} \left(\frac{a}{r} \right)^{\alpha_m-2} \right] \right\} \cos \alpha_m \theta, \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$\Psi_2 = \sum_{n=1}^{\infty} Z_n \frac{r}{\beta_n} P_n(\theta) \sin \beta_n \rho, \quad (5.8)$$

где

$$\alpha_m = \left(m - \frac{1}{2} \right) \frac{\pi}{\theta_0}, \quad \beta_n = \frac{n\pi}{l_0}, \quad l_0 = \ln \frac{b}{a}, \quad r_0 = \frac{a}{b}, \quad \rho = \ln \frac{r}{a}, \quad (5.9)$$

$$P_n(\theta) = \frac{\cosh \beta_n \theta}{\cosh \beta_n \theta_0} \cos \theta \sin \theta_0 - \frac{\sinh \beta_n \theta}{\sinh \beta_n \theta_0} \sin \theta \cos \theta_0. \quad (5.10)$$

Таким образом, мы выбираем представление (5.6) в таком виде, чтобы нулевые граничные условия (5.4) удовлетворялись тождественно.

Три последовательности коэффициентов X_m, Y_m и Z_n обеспечивают достаточную функциональную свободу для удовлетворения граничных условий по нормальным производным. Эти условия дают три функциональных уравнения, которые после ряда преобразований приводятся к двум несвязанным системам алгебраических уравнений

$$\left. \begin{aligned} \bar{X}_m s_m - \sum_{n=1,3,\dots}^{\infty} g_{mn} \bar{Z}_n &= \frac{a}{\theta_0} (V_{bot} - V_{top}), \quad m = 1, 2, 3, \dots \\ \bar{Z}_n \Delta_n - \sum_{m=1}^{\infty} h_{nm} \bar{X}_m &= 0, \quad n = 1, 3, 5, \dots \end{aligned} \right\} \quad (5.11)$$

и

$$\left. \begin{aligned} \bar{Y}_m t_m - \sum_{n=2,4,\dots}^{\infty} g_{mn} \bar{Z}_n &= \frac{a}{\theta_0} (V_{bot} + V_{top}), \quad m = 1, 2, 3, \dots \\ \bar{Z}_n \Delta_n - \sum_{m=1}^{\infty} h_{nm} \bar{Y}_m &= 0, \quad n = 2, 4, 6, \dots \end{aligned} \right\} \quad (5.12)$$

для неизвестных \bar{X}_m, \bar{Z}_n (n - нечетное) и \bar{Y}_m, \bar{Z}_n (n - четное), соответственно. Здесь были использованы новые неизвестные

$$\begin{aligned} \bar{X}_m &= -(X_m - Y_m r_0) (1 + r_0^{\alpha_m+1}) (1 + r_0^{\alpha_m-1}), \\ \bar{Y}_m &= -(X_m + Y_m r_0) (1 - r_0^{\alpha_m+1}) (1 - r_0^{\alpha_m-1}), \\ \bar{Z}_n &= Z_n a l_0 \frac{\cosh 2\beta_n \theta_0 + \cos 2\theta_0}{2\theta_0 \sinh 2\beta_n \theta_0}, \end{aligned} \quad (5.13)$$

и обозначения

$$\begin{aligned} g_{mn} &= \frac{8\alpha_m^2 \beta_n}{l_0 [(\alpha_m - 1)^2 + \beta_n^2] [(\alpha_m + 1)^2 + \beta_n^2]}, \\ h_{nm} &= \frac{4\alpha_m \beta_n^2}{\theta_0 [(\alpha_m - 1)^2 + \beta_n^2] [(\alpha_m + 1)^2 + \beta_n^2]}, \\ s_m &= \frac{1 - r_0^{2\alpha_m} + \alpha_m (r_0^{\alpha_m-1} - r_0^{\alpha_m+1})}{(1 + r_0^{\alpha_m-1})(1 + r_0^{\alpha_m+1})}, \\ t_m &= \frac{1 - r_0^{2\alpha_m} - \alpha_m (r_0^{\alpha_m-1} - r_0^{\alpha_m+1})}{(1 - r_0^{\alpha_m-1})(1 - r_0^{\alpha_m+1})}, \\ \Delta_n &= \frac{\sinh 2\beta_n \theta_0 + \beta_n \sin 2\theta_0}{\cosh 2\beta_n \theta_0 + \cos 2\theta_0}. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Бесконечные системы (5.11) и (5.12) являются вполне регулярными [5], т.е. для каждой строки бесконечной матрицы сумма модулей недиагональных членов будет меньше на некоторое положительное число, чем диагональный элемент. Следовательно, для ограниченных по величине правых частей единственное и ограниченное решение может быть найдено методом простой редукции, т.е.

$$\bar{X}_m = 0, \quad \bar{Y}_m = 0, \quad m > M, \quad \bar{Z}_n = 0, \quad n > 2N, \quad (5.15)$$

с последующим решением конечных систем $M + N$ уравнений, соответствующих системам (13)–(14).

Детальный анализ, данный в [42, 52], показывает следующее асимптотическое поведение

$$\begin{aligned}\bar{X}_m &= X + \bar{x}_m, & \bar{Y}_m &= Y + \bar{y}_m, \\ \bar{Z}_n &= Z_e + \bar{z}_n, \quad (n \text{ — четное}), & \bar{Z}_n &= Z_o + \bar{z}_n, \quad (n \text{ — нечетное}),\end{aligned}\quad (5.16)$$

где

$$X = \frac{\pi^2 a}{(\pi^2 - 4)\theta_0} (V_{bot} - V_{top}), \quad Y = \frac{\pi^2 a}{(\pi^2 - 4)\theta_0} (V_{bot} + V_{top}), \quad Z_o = \frac{2}{\pi} X, \quad Z_e = \frac{2}{\pi} Y \quad (5.17)$$

и

$$\bar{x}_m = O(\alpha_m^{-\operatorname{Re}\lambda_1}), \quad \bar{y}_m = O(\alpha_m^{-\operatorname{Re}\lambda_1}), \quad \bar{z}_n = O(\beta_n^{-\operatorname{Re}\lambda_1}), \quad (5.18)$$

при $m \rightarrow \infty$ и $n \rightarrow \infty$. Здесь $\lambda_1 = 2.739593 + i1.119025$ является наименьшим положительным корнем трансцендентного уравнения $\sin(\pi\lambda/2) + \lambda = 0$.

Такого рода асимптотическое поведение показывает, что метод простой редукции (5.15) является не эффективным, так как не может обеспечить ненулевые значения неизвестным с большими значениями индексов. Знание асимптотического поведения коэффициентов рядов Фурье существенно улучшает сходимость рядов вблизи границ путем выделения явной суммы медленно сходящихся членов. Конечно, влияние такого рода сумм менее важно внутри области: радиальные и угловые функции в выражениях (5.7) и (5.8) становятся пренебрежимо малыми с увеличением чисел m или n , соответственно. Следовательно, любая малая вариация коэффициентов $\bar{X}_m, \bar{Y}_m, \bar{Z}_n$ (даже их равенство нулю при $m > M$ и $n > 2N$) не изменит поле скоростей значительно внутри области. Но вопрос точности удовлетворения граничным условиям является существенно важным для точности решения всей задачи.

Согласно (5.18) неизвестные $\bar{x}_m, \bar{y}_m, \bar{z}_n$ убывают достаточно быстро и решение этих новых бесконечных систем методом редукции может быть получено на основе нескольких (обычно M и N меньше пяти) первых неизвестных.

Возвращаясь к коэффициентам X_m, Y_m, Z_n , запишем их как

$$X_m = R_b + x_m, \quad Y_m = R_t + y_m, \quad Z_n = F_b + (-1)^n F_t + z_n, \quad (5.19)$$

при

$$R_b = -\frac{\pi^2 a V_{bot}}{\theta_0(\pi^2 - 4)}, \quad R_t = -\frac{\pi^2 b V_{top}}{\theta_0(\pi^2 - 4)}, \quad F_b = \frac{4\pi a V_{bot}}{l_0(\pi^2 - 4)}, \quad F_t = \frac{4\pi b V_{top}}{l_0(\pi^2 - 4)}. \quad (5.20)$$

Громоздкие выражения для x_m, y_m, z_n здесь не выписаны, однако и они убывают как

$$x_m = O(\alpha_m^{-\operatorname{Re}\lambda_1}), \quad y_m = O(\alpha_m^{-\operatorname{Re}\lambda_1}), \quad z_n = O(\beta_n^{-\operatorname{Re}\lambda_1}), \quad (5.21)$$

когда $m \rightarrow \infty$ и $n \rightarrow \infty$.

Подстановка (5.19) в (5.7) и (5.8) дает окончательное выражение для функции тока в кольцевой клиновидной полости

$$\begin{aligned} \Psi = & R_b \left(\frac{r^2}{a^2} - 1 \right) S \left(\frac{a}{r}, \theta \right) - R_t \left(1 - \frac{r^2}{b^2} \right) S \left(\frac{r}{b}, \theta \right) + \\ & + F_b r P_+(\rho, \theta) + F_t r P_-(\rho, \theta) + r \sum_{n=1}^{\infty} \frac{z_n}{\beta_n} P_n(\theta) \sin \beta_n \rho - \\ & - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\alpha_m} \left\{ \left(\frac{r^2}{a^2} - 1 \right) \left[(x_m + R_b) r_0^{\alpha_m} \left(\frac{r}{b} \right)^{\alpha_m} - x_m \left(\frac{a}{r} \right)^{\alpha_m} \right] + \right. \\ & \left. + \left(1 - \frac{r^2}{b^2} \right) \left[(y_m + R_t) r_0^{\alpha_m} \left(\frac{a}{r} \right)^{\alpha_m} - y_m \left(\frac{r}{b} \right)^{\alpha_m} \right] \right\} \cos \alpha_m \theta, \end{aligned} \quad (5.22)$$

где использованы следующие обозначения для сумм

$$P_+(\rho, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\beta_n} P_n(\theta) \sin \beta_n \rho, \quad P_-(\rho, \theta) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\beta_n} P_n(\theta) \sin \beta_n \rho, \quad (5.23)$$

$$S(\xi, \theta) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\alpha_m} \xi^{\alpha_m} \cos \alpha_m \theta = \frac{\theta_0}{\pi} \operatorname{arctg} \left[\frac{2\xi^{\pi/2\theta_0} \cos(\pi\theta/2\theta_0)}{1 - \xi^{\pi/\theta_0}} \right]. \quad (5.24)$$

Функции $P_+(\rho, \theta)$ и $P_-(\rho, \theta)$ могут быть преобразованы в быстро сходящиеся ряды вида

$$\begin{aligned} P_+(\rho, \theta) = & \sum_{\nu=1,3,\dots}^{\infty} \{ \sin(\theta_0 - \theta) [S_+(\rho, 2\nu - \theta_0 - \theta) - S_+(\rho, 2\nu + \theta_0 + \theta)] + \\ & + \sin(\theta_0 + \theta) [S_+(\rho, 2\nu - \theta_0 + \theta) - S_+(\rho, 2\nu + \theta_0 - \theta)] \}, \\ P_-(\rho, \theta) = & \sum_{\nu=1,3,\dots}^{\infty} \{ \sin(\theta_0 - \theta) [S_-(\rho, 2\nu - \theta_0 - \theta) - S_-(\rho, 2\nu + \theta_0 + \theta)] + \\ & + \sin(\theta_0 + \theta) [S_-(\rho, 2\nu - \theta_0 + \theta) - S_-(\rho, 2\nu + \theta_0 - \theta)] \}, \end{aligned} \quad (5.25)$$

где

$$\begin{aligned} S_+(\rho, \eta) = & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\beta_n} e^{-\beta_n \eta} \sin \beta_n \rho = \frac{l_0}{\pi} \operatorname{arctan} \left[\frac{\sin(\pi\rho/l_0)}{e^{\pi\eta/l_0} - \cos(\pi\rho/l_0)} \right], \\ S_-(\rho, \eta) = & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{\beta_n} e^{-\beta_n \eta} \sin \beta_n \rho = -\frac{l_0}{\pi} \operatorname{arctan} \left[\frac{\sin(\pi\rho/l_0)}{e^{\pi\eta/l_0} + \cos(\pi\rho/l_0)} \right]. \end{aligned} \quad (5.26)$$

Вследствие асимптотического поведения (5.21), бесконечные суммы (5.23), а также их почленные первые производные по r и θ быстро сходятся во всей области, включая и границы. Следовательно, при численных расчетах достаточно оставить несколько первых членов (обычно, до пяти). Кроме того, первые производные функций $S(a/r, \theta)$ и $S(r/b, \theta)$ дают конечный вклад в поле скоростей на границе, что может быть вычислено предельными переходами.

Отметим, что члены R_b , R_t , F_b и F_t в выражении (5.23) соответствуют локально решению Гудьера [36] и Тейлора (см., [2]) для течения Стокса в четверть плоскости с разрывной тангенциальной скоростью, прикладываемой только вдоль одной границы. Локальное представление

функции тока в угловой точке, а также амплитуда вихрей Моффатта [57] подробно представлены в [42].

Таким образом, компоненты поля скоростей могут быть вычислены как соответствующие первые производные функции тока (5.23) и представляются в виде быстро сходящихся рядов во всей области, включая границы.

Перейдем теперь к определению периодических точек течения и описанию алгоритма для их отыскания. Предлагаемый алгоритм для отыскания периодических точек, уменьшает порядок поиска из двумерного во всей полости в *одномерную* процедуру отыскания корней r^* на центральной линии $\theta = 0$. Этот алгоритм представлен очень подробно в работе [54] для прямоугольной полости. Кратко, его суть состоит в следующем. Рассмотрим точку $(r_{T/4}, 0)$, которая в момент $t = T/4$ расположена на линии симметрии $\theta = 0$. Из-за симметрии протокола (5.1) по времени очевидно, что в моменты $t = 0$ и $t = T/2$ эта точка занимает положения $(r_1, -\theta_1)$ и (r_1, θ_1) , соответственно. Теперь, если в момент $t = 3T/4$ эта точка снова окажется на линии симметрии $\theta = 0$ с координатами $(r_{3T/4}, 0)$, тогда в моменты $t = T/2$ и $t = T$ её положения — (r_1, θ_1) и $(r_1, -\theta_1)$, соответственно. Поэтому, точка $(r_1, -\theta_1)$ является периодической точкой периода-1, и сценарий $[T/4 - 3T/4]$ может быть представлен как следующий:

Взять в момент $t = T/4$ любую точку $(r_{T/4}, 0)$ на линии симметрии, проинтегрировать систему уравнений адвекции (1.1) до $t = 3T/4$, и проверить расположена ли точка $(r_{3T/4}, \theta_{3T/4})$ на линии симметрии. Таким образом, если r^* - корень уравнения

$$\theta_{(T/4, 3T/4)}(r^*, 0) = 0, \quad (5.27)$$

(здесь и далее индексы в круглых скобках показывают интервал, в пределах которого система (1.1) интегрируется, а аргументы представляют начальные условия для этой системы) тогда точка $(r_1, -\theta_1)$ с $r_1 = r_{(T/4, T/2)}(r^*, 0)$, $\theta_1 = \theta_{(T/4, T/2)}(r^*, 0)$ является периодической периода 1.

Геометрически эта периодическая точка расположена на пересечении двух устойчивых линий тока $\Psi_{bot}(r, \theta) = C_{bot}$ и $\Psi_{top}(r, \theta) = C_{top}$, соответствующих движению нижней и верхней круговых стенок. Только по этим двум линиям периодическая точка может вернуться в первоначальное положение.

Классифицировать тип периодической точки (эллиптическая или гиперболическая) можно аналитически, определяя собственные значения λ_1 и λ_2 Якобиана матрицы линеаризованной системы (1.1) в окрестности точки. Если λ_1 и λ_2 являются комплексно сопряженными, периодическая точка имеет эллиптический тип. Если λ_1 и $\lambda_2 = 1/\lambda_1$ являются действительными, периодическая точка имеет гиперболический тип. Также может существовать ситуация $\lambda_1 = \lambda_2 = \pm 1$, что соответствует случаю вырождения, когда периодическая точка является параболической: при этом любое малое изменение протокола перемешивания (то есть величины Θ) ведет к тому, что периодическая точка становится эллиптического или гиперболического типа.

Элементы Якобиана матрицы \mathbf{M} могут быть вычислены, решая систему (1.1) для четырех начальных состояний $(\bar{x} + \varepsilon, \bar{y})$, $(\bar{x} - \varepsilon, \bar{y})$, $(\bar{x}, \bar{y} + \varepsilon)$, $(\bar{x}, \bar{y} - \varepsilon)$ (где (\bar{x}, \bar{y}) — прямоугольные координаты периодической точки), а ε — малое число (например, $\varepsilon = 0.005a$)

$$\begin{aligned} M_{xx} &= \frac{x_{(0,T)}(\bar{x} + \varepsilon, \bar{y}) - x_{(0,T)}(\bar{x} - \varepsilon, \bar{y})}{2\varepsilon}, & M_{xy} &= \frac{x_{(0,T)}(\bar{x}, \bar{y} + \varepsilon) - x_{(0,T)}(\bar{x}, \bar{y} - \varepsilon)}{2\varepsilon}, \\ M_{yx} &= \frac{y_{(0,T)}(\bar{x} + \varepsilon, \bar{y}) - y_{(0,T)}(\bar{x} - \varepsilon, \bar{y})}{2\varepsilon}, & M_{yy} &= \frac{y_{(0,T)}(\bar{x}, \bar{y} + \varepsilon) - y_{(0,T)}(\bar{x}, \bar{y} - \varepsilon)}{2\varepsilon}. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Условие, что детерминант матрицы \mathbf{M} должен быть равен единице, используется, чтобы проверить точность вычислений.

Грин [37] ввел величину, названную *вычетом периодической точки*, и определяемую как

$$R = \frac{1}{2} - \frac{1}{4}\text{Tr}(\mathbf{M}) = \frac{1}{2} - \frac{1}{4}(M_{xx} + M_{yy}) \quad (5.29)$$

Легко показать, что условие $0 < R < 1$ определяет *эллиптическую* периодическую точку (λ_1 и λ_2 являются комплексно сопряженными), в то время, если $R < 0$ (λ_1 и λ_2 положительные) или $R < 1$ (λ_1 и λ_2 отрицательные величины) эти условия характеризуют *гиперболическую* периодическую точку.

Для гиперболической периодической точки существуют две инвариантные кривые $W_H^{(s)}$ и $W_H^{(u)}$, названные устойчивым и неустойчивым многообразиями. Эти многообразия могут быть построены, окружая периодическую гиперболическую точку достаточно малым кругом, скажем, радиуса $0.001a$ и затем используя упомянутый выше алгоритм слежения за линией контура согласно прямому и обратному протоколу перемешивания (5.1). Обратный протокол соответствует изменению в (5.1) Θ на $-\Theta$ и началу движения на верхней круговой границе.

Для обнаружения периодических точек более высоких периодов могут быть применены следующие аналогичные алгоритмы:

Период-2: — Сценарий $[T/4 - 5T/4]$: если r^{**} — корень уравнения $\theta_{(T/4, 5T/4)}(r^{**}, 0) = 0$, тогда точка (r_2, θ_2) с $r_2 = r_{(T/4, T/2)}(r^{**}, 0)$, $\theta_2 = -\theta_{(T/4, T/2)}(r^{**}, 0)$ является периодической.

— Сценарий $[3T/4 - 7T/4]$: если r^{**} — корень уравнения $\theta_{(3T/4, 7T/4)}(r^{**}, 0) = 0$, тогда точка (r_2, θ_2) с $r_2 = r_{(3T/4, 3T/2)}(r^{**}, 0)$, $\theta_2 = -\theta_{(3T/4, 3T/2)}(r^{**}, 0)$ является периодической.

Период -3: — Сценарии $[T/4 - 7T/4]$, $[3T/4 - 9T/4]$, $[5T/4 - 11T/4]$.

Период -4: — Сценарии $[T/4 - 9T/4]$, $[3T/4 - 11T/4]$, $[5T/4 - 13T/4]$, $[7T/4 - 15T/4]$.

Период -5: — Сценарии $[T/4 - 11T/4]$, $[3T/4 - 13T/4]$, $[5T/4 - 15T/4]$, $[7T/4 - 17T/4]$, $[9T/4 - 19T/4]$.

Период -6: — Сценарии $[T/4 - 13T/4]$, $[3T/4 - 15T/4]$, $[5T/4 - 17T/4]$, $[7T/4 - 19T/4]$, $[9T/4 - 21T/4]$, $[11T/4 - 23T/4]$. И т.д.

Каждая периодическая точка периода- n имеет $n - 1$ спутников, соответствующих ее положениям в моменты $T, 2T, \dots, (n - 1)T$. Поэтому, сценарии не всегда дают новые периодические точки, иногда они определяют некоторые спутники уже найденных точек. В любом случае, эти алгоритмы обеспечивают эффективную процедуру поиска периодических точек в кольцевой полости клина.

5.3. Определение когерентных структур

Данный подраздел посвящен применению разработанной методологии исследования процессов периодического смешивания вязких жидкостей к анализу смешивания жидкостей в секторной полости при $\theta_0 = \pi/4$ и $b/a = 2$. Целью анализа является определение наиболее эффективного протокола смешивания и определение положения начального закрашенного пятна, которое будет в процессе перемешивания наиболее однородно распределено по всей полости. Для сравнения эффективности различных протоколов смешивания мы должны уметь оценивать затраченную в процессе энергию. Предполагаем, что все протоколы имеют одинаковую угловую скорость $2\Theta/T$. Тогда, совокупное перемещение, выполненное стенками полости может служить мерой количества работы, проделанной при перемещении границ (т. е. потребленной энергии). Для периодического протокола (5.1), эта энергия равна $\Theta(a+b)$ для одного периода, и $\Theta(a+b)N_p$ для N_p периодов или, в безразмерной форме, $W = \Theta(a+b)N_p/(\theta_0 a) = 3HN_p$, где безразмерный параметр $H = \Theta/\theta_0$.

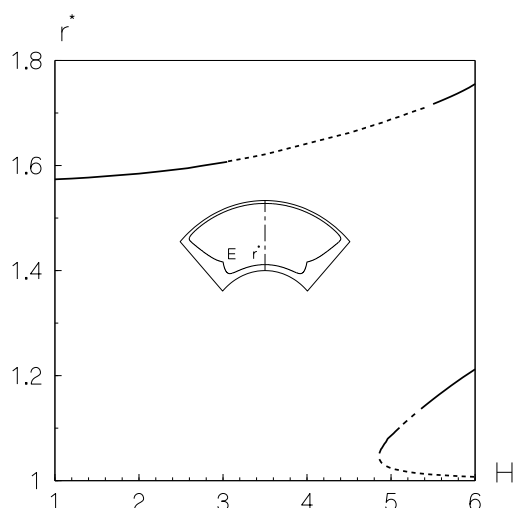


Рис. 9. Бифуркационная диаграмма существования периодических точек.

На рис. 9 показана бифуркационная диаграмма корней r^* уравнения (5.27) (т. е. положений r^* периодической точки периода-1 на центральной линии полости) в зависимости от значений H . Откуда следует, что при $H < 4.86$ существует только один корень уравнения, а значит и только одна периодическая точка периода-1. Она меняет свой тип при $H = 3.05$, переходя из эллиптической (соответствующей сплошной линии) в гиперболическую (пунктирная линия). Вторая бифуркационная кривая появляется при $H \geq 4.86$. При этом верхняя кривая показывает изменение типа периодической точки при $H = 5.48$, на этот раз периодическая точка из гиперболической становится эллиптической. Вторая бифуркационная кривая указывает на наличие как эллиптических (сплошные линии), так и гиперболических (пунктирные участки кривой) периодических точек периода-1. В центральной части графика в геометрии рассматриваемой полости приведена типичная траектория периодической точки периода-1, описываемая точкой E за период.

В дальнейшем мы ограничиваем наше рассмотрение случаем $H = 4$. Координаты всех периодических точек до периода-6 включительно представлены на рис. 10, где сплошной квадратик соответствует гиперболической точке периода-1 (для $H = 4$ существует только одна периодическая точка этого периода). Кружечками на графике показаны координаты периодических точек периода-2, крестиками — периода-4 и точками — периода-6. Периодические точки периодов-3 и -5 не показаны, т. к. они расположены вблизи границы полости. Показанные периодические точки в основном являются гиперболическими, что свидетельствует о том, что выбранный протокол с $H = 4$ обеспечивает хорошее и быстрое перемешивание. Следует также отметить тот факт, что традиционный метод отображений Пуанкаре через 2, 4 и 6 периодов вряд ли может обнаружить наличие всех периодических точек периодов-2, -4 и -6, т. к. соответствующие этим точкам эллиптические острова занимают слишком малые области.

На рис. 7 были представлены 4 полости с картинами смесей и начальными положениями круглых пятен, которые были подвергнуты различным протоколам смешивания. Верхняя, нижняя и левая полости представляют результаты смешивания при одном протоколе, а именно периодическом протоколе с $H = 4$ после 12 периодов ($N_p = 12$). Правая полость, в которой начальное пятно практически не распределилось по всей области, демонстрирует результат смешивания

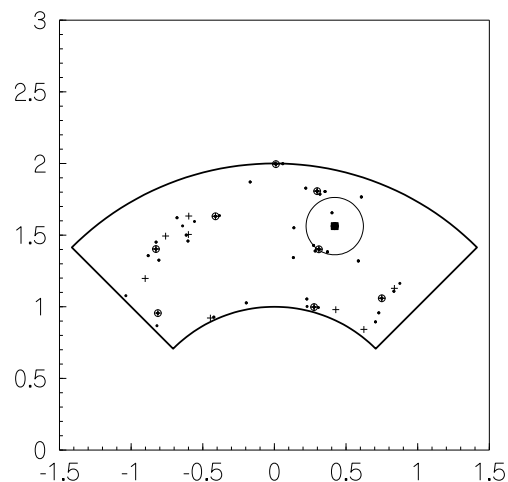


Рис. 10. Расположение периодических точек первого-шестого порядка.

для $H = 2$. Несмотря на то, что процесс смешивания проводился для этой полости в два раза дольше, т.е. результаты соответствуют 24 периодам, $N_p = 24$ и, таким образом, общая работа $W = \Theta(a + b)N_p/(\theta_0 a) = 3HN_p$ для всех полостей одинакова, результаты смешивания принципиально различны. Наилучшее смешивание соответствует случаю, представленному в верхней полости, когда начальное пятно разделено на 4 малых круглых пятна, помещенных в разных районах полости. Нижняя картина соответствует случаю смешивания одного пятна, помещенного начально вокруг единственной для протокола с $H = 4$ периодической точки периода-1 (как это показано окружностью на рис. 10). Поскольку выбранная периодическая точка является гиперболической, через нее проходит неустойчивое многообразие, а точки в ее окрестности характеризуются хаотическими траекториями (т.е. разбегаются экспоненциально друг от друга), начальное пятно довольно однородно распределилось по всей полости. Левая полость дает результат смешивания при таком же самом протоколе (как и в нижней полости), но при другом (хотя и почти рядом) начальном положении пятна. Из рис. 7 видно, что в картине смеси есть пустоты, т.е. нет сравнительно одинакового проникновения закрашенной жидкости во все районы полости. Правая полость имеет наихудший результат смешивания, т.к. начальное положение пятна выбрано вокруг эллиптической точки периода-1 (единственной для протокола с $H = 2$), поэтому принципиально достигнуть хорошего смешивания для такого начального положения невозможно. Как следует из анализа когерентных структур, предложенного в работе [53], области вокруг эллиптических точек ведут себя как эластичноподобные, они только слегка деформируются, возвращая все вещество в область вокруг эллиптической точки.

Графики картин смесей были построены на рис. 7 с использованием алгоритма слежения за деформированием линии контура начального круглого пятна (или пятен), предложенного в настоящем исследовании. Преимущества такого алгоритма продемонстрированы на рис. 11. Начальный круглый контур радиуса $R = 0.2a$ с центром в гиперболической точке периода-1 представлен с использованием 25 точек на рис. 11 (а). На рис. 11 (б) линия контура после двенадцати периодов смешивания построена с использованием положений $5 \cdot 10^4$ точек. При этом были применены следующие критерии: расстояние между любыми двумя соседними точками было не больше, чем $l_{dis} = 0.03a$ и не меньше, чем $l_{cur} = 0.015a$. Важно подчеркнуть что, из-за экс-

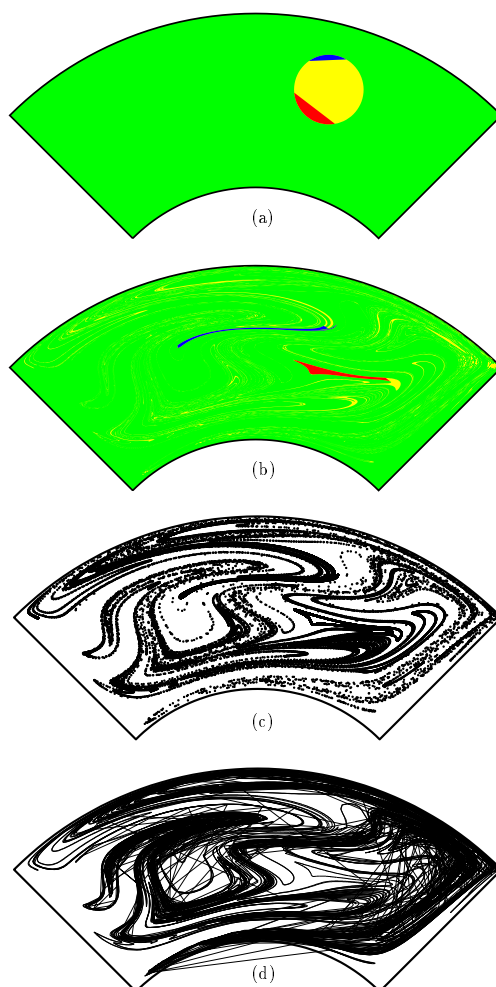
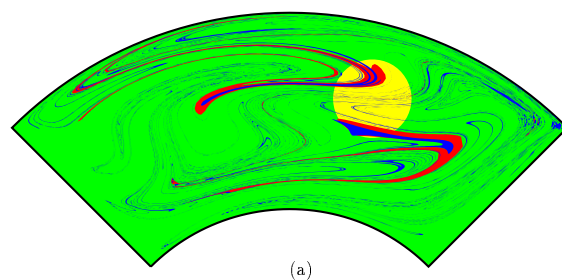


Рис. 11. Контурные линии (а) — начальное положение пятна и после 12 периодов (б) с применением алгоритма (в, г) — традиционным методом.

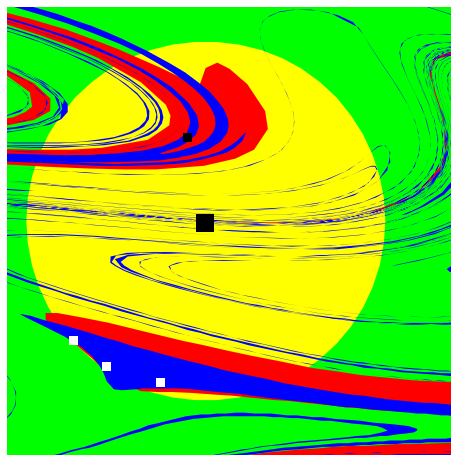
поперечного и неоднородного вдоль линии контура растяжения приблизительно 40% длины начальной линии контура (пунктирные участки границы на рис. 11 (а)) занимает лишь только 0.2% заключительной длины (эти участки показаны также пунктирной линией на рис. 11 (б)). В то же время часть начальной линии контура, показанная сплошной линией, растягивается приблизительно в 10^3 раз. Вследствие экспоненциального разбегания соседних точек в окрестности гиперболической точки, подход, основанный на представлении контура капли как первоначально однородно распределенных точек, может дать лишь качественную картину смешивания, не сохраняя топологические свойства. Так, на рис. 11 (в) показано положение $5 \cdot 10^4$ точек, первоначально однородно распределенных по окружности радиуса $R = 0.2a$ с центром в гиперболическом центре периода-1 (см. рис. 11 (а)), после двенадцати периодов. Расположение этих точек качественно напоминает картину смеси на рис. 11 (б), каждая точка после 12 периодов занимает правильное положение, находясь на контуре, но, если соединить эти точки, то картина смеси будет такой, как показано на рис. 11 (г). Длина линии контура (если можно применить в данном случае слово «длина») — только на 4% меньше, чем длина контура, показанного на рис. 11 (б).

В тоже самое время площадь, ограниченная таким контуром, как на рис. 11 (г), будет в шесть раз больше реальной площади начального пятна. Заметим, что для того, чтобы получить величину реальной площади (после 12 периодов смешивания), но применять в начальный момент равномерно распределенные по контуру точки, необходимо использовать $5 \cdot 10^7$ точек.

Точное знание расположения контурной линии пятна дает возможность строить эйлерово (т. е. в пространстве) описание картины смеси. На рис. 12 (а) дано такое представление результата смешивания начального пятна, показанного на рис. 11 после 12 периодов при $H = 4$. Имеется



(a)



(b)

Рис. 12. Картина смеси (а) — во всей полости и (б) — в области начального расположения круглого пятна.

два главных компонента в структуре смеси: один компонент, сформированный тонкими нитями с уменьшающейся в процессе смешивания толщиной, и другой, соответствующий малым «эластичным» областям, которые не размешиваются вовсе (на рис. 12 (б) показана такая тёмная треугольная область в увеличенном виде). Что создает эти элементы структуры? Прежде всего, неустойчивое многообразие, которое проходит через центр начального пятна (черный квадратик в центре на рис. 12 (б)). На рис. 13 (а) показано расположение этого многообразия в исследуемой полости. Из сравнения рисунков смеси и многообразия видно, что оно играет роль «автомагистрали», по которой происходит смешивание. График многообразия не содержит только «эластичную» область. Ее создают эллиптические точки периодов -2, -4, -6, расположение которых показано белыми квадратиками на рис. 12 (б).

На рис. 13 (б) выделена та же область полости, что и на рис. 12 (б), в которой показано как деформируются маленькие (начально круглые) подобласти, окружающие периодические

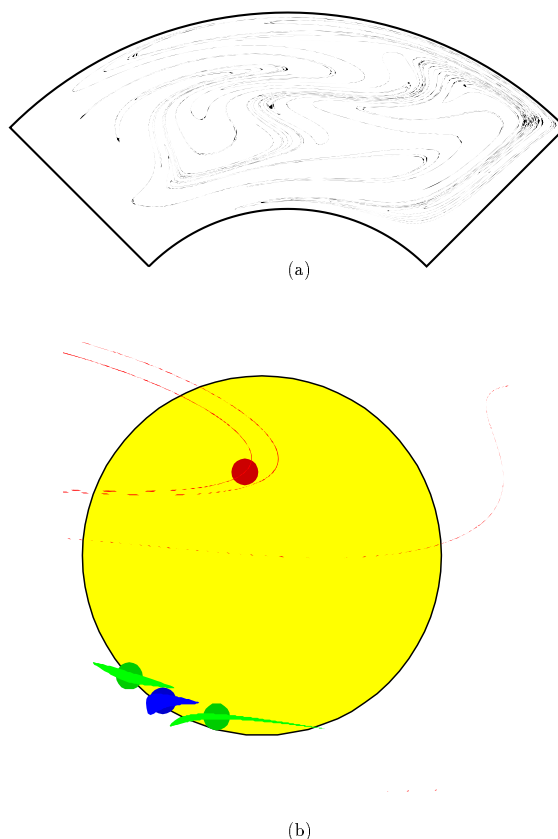


Рис. 13. Элементы когерентных структур: (а) — неустойчивое многообразие во всей полости и (б) — «эластичные» зоны в области начального расположения круглого пятна

точки, имеющие координаты, соответствующие белым квадратикам на рис. 12 (б) (ср. с рис. 10). Верхний кружечек, окружает гиперболическую точку периода-4 (показанную черным маленьким квадратиком на рис. 12 (б)), поэтому он растягивается до тонких нитей. В то время как три нижних кружечка только слегка вытягиваются, не теряя материала крашенной жидкости. Именно их «эластичный» материал и составляет «эластичную» треугольную область, показанную тёмным цветом на рис. 12 (б).

Теперь применим изложенные выше критерии оценки качества смеси. Динамика во времени трех критериев, основанных на «грубой» плотности D_n , показана на рис. 14 для трех различных размеров ячеек (кривые 1 соответствуют вычислениям с ячейками со стороной квадрата $\delta = 0.1a$; кривые 2 — с $\delta = 0.05a$; кривые 3 — с $\delta = 0.025a$). Протокол смешивания и начальное положение пятна — такие же как на рис. 11 и 12 (а). Процесс смешивания характеризуется уменьшением квадратичной плотности $\langle D^2 \rangle / \langle D \rangle^2$ (рис. 14 (а)), интенсивности сегрегации I (рис. 14 (б)) и увеличением энтропии e/e_0 (рис. 14 (в)) с увеличением числа полупериодов $2t/T$. Из рис. 14 (а, б) следует, что интенсивность и квадратичная плотность дают ту же самую динамику, но в разных масштабах. Причем предпочтительно использовать интенсивность потому, что ее значения всегда находятся в одном и том же диапазоне (0,1). Используя этот критерий, можно сравнивать процессы с различной величиной начального пятна, т. е. с различным отношением площадей закрашенного пятна и полости S_b/S , и сравнивать различные смеси с тем же самым отношением S_b/S . Например, легко ответить на вопрос, когда интенсивность сегрегации

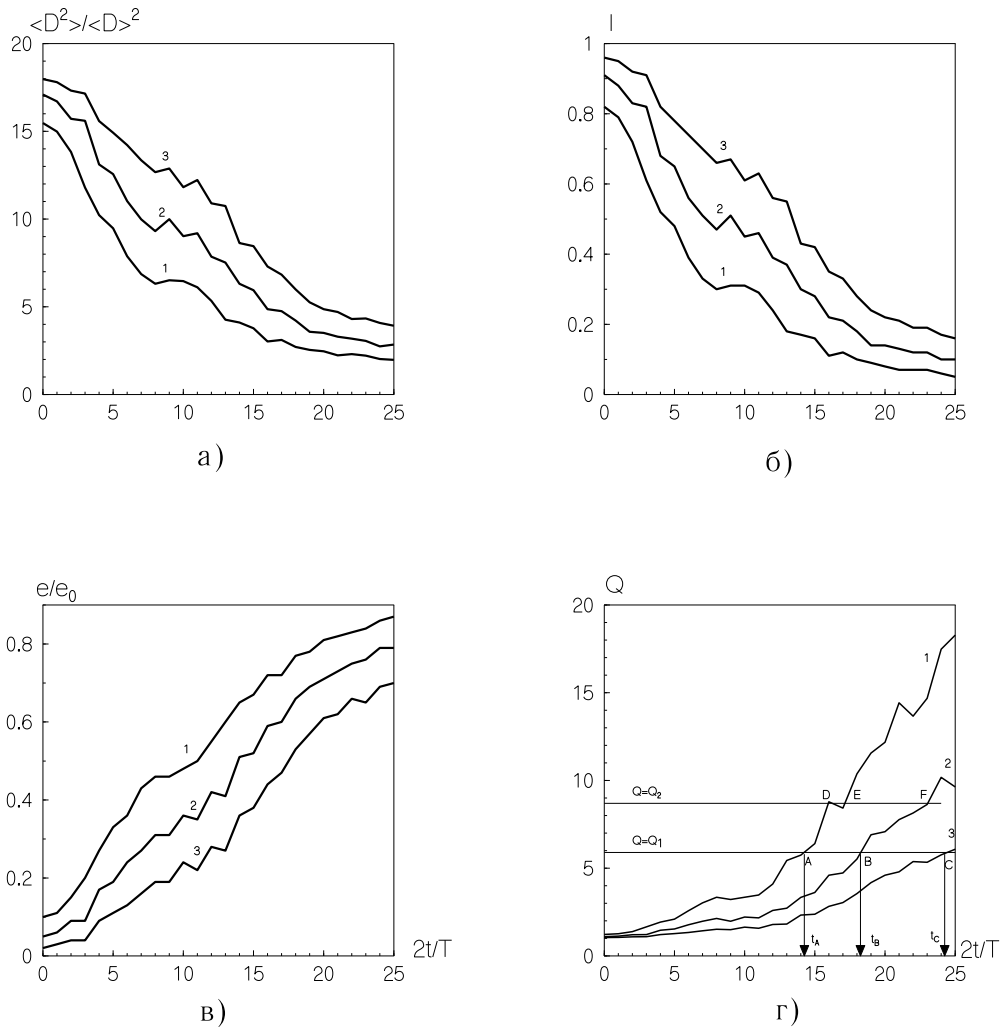


Рис. 14. Динамика критериев качества в зависимости от числа полупериодов.

будет равна заданной величине для различных размеров ячеек, только рисуя горизонтальную линию $I = \text{const}$. Если мы считаем, что смесь достаточно однородна (для данного выбранного размера ячейки), когда I — меньше, чем некоторая величина I_{\min} , то из рис. 14 (б), можно определить, как долго мы должны продолжать смешивание, чтобы получить такую же однородную смесь и в других масштабах. Если для оценки качества смеси предпочтительно оперировать с величиной, которая возрастает во времени, то можно использовать либо энтропию (рис. 14 (в)), либо так называемое «качество смеси» [43], которое определяется как величина, обратная I . На рис. 14 (г) показано, как по качеству смеси определяется когда (после сколько полупериодов смешивания) смесь для трех различных размеров ячеек имеет одно и тоже качество Q_1 (абсциссы точек A, B, C на рис. 14 (г)).

На рис. 15 представлены результаты смешивания с использованием одинакового протокола с $H = 4$ в четырех равных клиновидных полостях при различных расположениях начальных пятен (оно показано черными кругами).

В левой и правой полостях начальное пятно сосредоточено вокруг гиперболической точки периода -2 и покрывает три гиперболических точки периода -6 и одну периода -4. Показанные

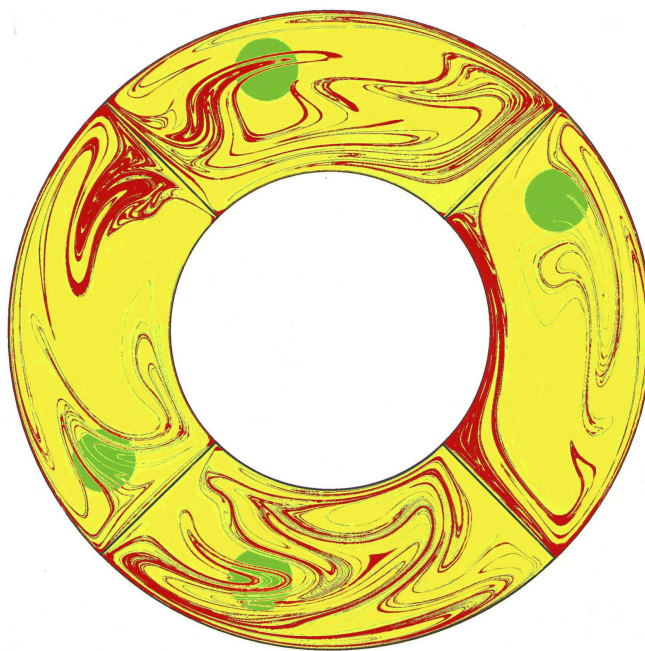


Рис. 15. Смеси, имеющие различное растяжение начального контура.

в этих полостях изогнутые черные рисунки смесей получены после 18.5 (правая полость) и 19 периодов (левая). Контурная линия начального круга при этом растягивается в 1760 (в правой полости) и 2010 (в левой) раз. Визуально однако видны пустоты, не заполненные краской в средней части полостей. Действительно, оценивая распределение краски по всей полости и подсчитав, например, интенсивность сегрегации I в масштабе с величиной стороны ячейки $\delta = 0.025a$, получаем, что качеству смеси в правой полости соответствует $I = 0.21$, а в левой — $I = 0.20$. В верхней полости начальное положение пятна было выбрано вокруг другой гиперболической точки периода -2. Растяжение контурной линии в этом случае почти такое же большое, как и в предыдущих, а именно, линия растягивается в 1850 раз. Но качество смеси гораздо лучше, т. к. нет больших пустот. Этот факт отражает величина интенсивности в той же шкале $\delta = 0.025a$, которая имеет величину $I = 0.17$. Наконец, в нижней полости начальное положение пятна было выбрано вокруг гиперболической точки периода -1. Растяжение контурной линии начального пятна самое низкое, почти в два раза меньше, чем в верхней полости (грубо можно его оценить как в два раза меньше, чем во всех остальных полостях) и равно 986. При этом из рис. 15 картины смеси в нижней полости видно, что смесь распределилась во все подобласти полости и имеет интенсивность качества наименьшую (наилучшую) $I = 0.15$. Таким образом, наибольшее растяжение длины начального контура не гарантирует наилучшего по качеству смешивания, так как расчеты критериев качества (интенсивности сегрегации, например) показывают что, в случае наибольшего растяжения (левая полость), качество смешивания соответствует такому же по качеству смешиванию для наилучшего начального положения пятна (нижняя полость), когда растяжение было почти в три раза меньше, а именно, оно соответствует смеси в нижней полости после 18 полупериодов, когда растяжение равнялось 560. Наоборот, смешивание с наихудшим растяжением может приводить к наилучшей по качеству смеси, что видно из картин смесей на рис. 15.

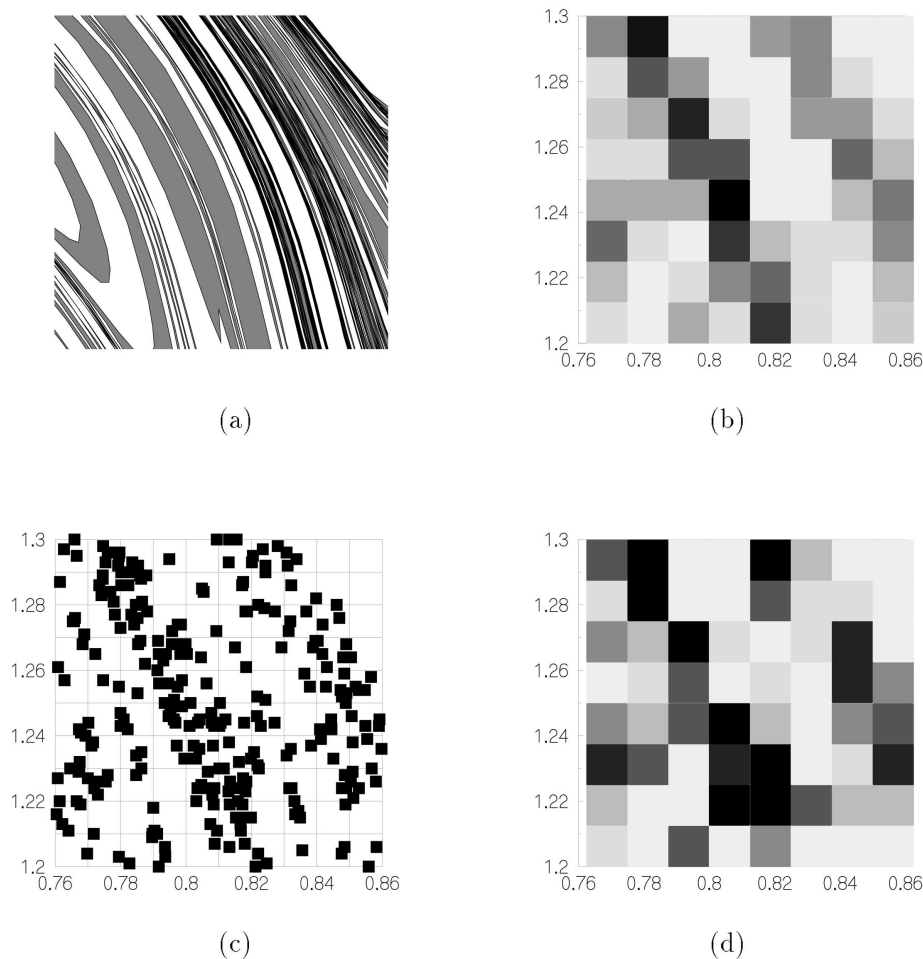


Рис. 16. Картины смесей (а, в) и распределение интенсивности сегрегации (б, г), вычисленные различными методами

Выше мы указали на то, насколько важно при вычислениях критериев качества пользоваться алгоритмом слежения за изменением линии контура, разделяющего подобласти с жидкостями, которые смешиваются. Остановимся на этом подробнее. Рассмотрим случай смешивания с наибольшим растяжением, который показан на рис. 15 в левой полости. Интенсивность сегрегации I была рассчитана для этого случая и другим методом: с использованием набора N однородно распределенных внутри начальной области пятна точек. При таком традиционном методе не существует критерия точности вычислений, основанных на сохранении лишь числа точек N , то есть на сохранении меры Лебега. Вычисления с $N = 10^4$, равномерно распределенными внутри пятна, дали ошибку в вычислениях I до 35% величины интенсивности сегрегации, если сравнивать с результатами, полученными на основе алгоритма слежения за деформированием контура, который позволяет проверять точность вычислений. Более того, для смешивания с экспоненциальным большим растяжением контура вычисления с любым числом точек N рано или поздно теряют точность. Подход же, использующий алгоритм слежения за линией контура, не имеет такого недостатка, т. к. изначально основан на применении критерия точности вычислений, а именно, на проверке точности выполнения закона сохранения площади начального подкрашенного пятна. Сравнение грубоплотностных представлений интенсивности сегрегации,

определенной с использованием алгоритма слежения за линией контура, и вычисленной с равномерно распределенными $N = 10^4$ точками показано на рис. 16 (б, г), соответственно. Для усиления эффекта только часть рисунка смеси (левая полость на рис. 15) показана на рис. 16 (а). Жидкость начального пятна подкрашена светло-серой краской, а контурная линия раздела жидкостей нарисована черной линией. Из рис. 16 (а) видно, что в той части полости, где смесь имеет множество тонких линий (расположенных вдоль «автомагистралей» неустойчивого многообразия и представляющих собой первый элемент когерентной структуры смеси), картина выглядит черной, хотя серого материала пятна там мало. Поэтому там мало темно-черных квадратиков в грубоплотностном представлении интенсивности сегрегации на рис. 16 (б). Эта же часть картины смеси, представленная с использованием равномерно распределенных $N = 10^4$ точек, дана на рис. 16 (в), где присутствует большое количество точек вследствие наличия огромного количества нитей на «автомагистралей» неустойчивого многообразия. Поэтому намного больше темных квадратиков на рис. 16 (г) и намного выше величина I . Сравнение рис. 15 (б) и (г), показывает очевидное различие в вычислениях, а именно: величина I , вычисленная по традиционному методу равномерно распределенных точек, на 35% больше, чем вычисленная с использованием метода слежения за деформированием контурной линии и проверки точности сохранения площади пятна.

Другой важной проблемой исследования хаотического смешивания является проблема обратимости во времени всех мер. Имеются два вопроса в этой проблеме. Один — обратимость индивидуальных точек, представляющих линию контура после некоторого времени T_R к их начальным положениям через время $2T_R$. Второй вопрос связан с сохранением площади пятна и поэтому с обратимостью всех мер. Вычисления с 30000 точек *равномерно* распределенных по начальному контуру, представленному на рис. 11 (а), показали точную обратимость их всех после десяти периодов движений вперед и столько же обратно. Несмотря на точные вычисления индивидуальных положений точек, уже после двух периодов площадь пятна не была сохранена, и относительная ошибка после девяти периодов была, например, 70% (т. е. 70% первоначальной площади пятна была «потеряна»). Вычисления, основанные на нашем алгоритме с *неравномерно* распределенными точками, показали сохранение площади для двенадцати периодов прямого движения и двенадцать периодов обратного (погрешность составляла меньше 1% начальной площади пятна). В этом случае вычисления всех грубоплотностных мер, основанные на сохранении площади пятна, являются надежным. Однако и для такого рода вычислений не все точки возвращаются на свои начальные позиции. После обратного процесса некоторые из точек расположены вдоль линий неустойчивого многообразия для обратного движения (которое совпадает с устойчивым многообразием для прямого движения). Вклад площади этих линий в площадь пятна пренебрежимо мал. Таким образом, мы можем заключить, что вычисление мер показывает полную обратимость, несмотря на невозвращение некоторых индивидуальных точек.

Наконец, рассмотрим поведение статистических мер второго порядка, а именно, динамику масштаба сегрегации, поскольку он показывает средний размер несмешиваемых «эластичных» областей. На рис. 17 (а) показана динамика масштабов сегрегации в двух направлениях x и y для того же самого процесса смешивания, который использовался для вычислений мер первого порядка (изображенных на рис. 14) и для тех же самых трех размеров ячеек. Первоначально, масштабы в x (сплошные линии) и y направлениях (пунктирные линии) являются почти равными и дают приблизительно безразмерный радиус начальной пятна 0.2 ($R = 0.2a$). При расчетах с $\delta = 0.1a$ (кривая 1 на рис. 17 (а)) ошибка в величине R является приблизительно 9%, в подсчете с $\delta = 0.05a$ (кривая 2), а также при подсчете с $\delta = 0.025a$ (кривая 3) она слегка больше. С течени-

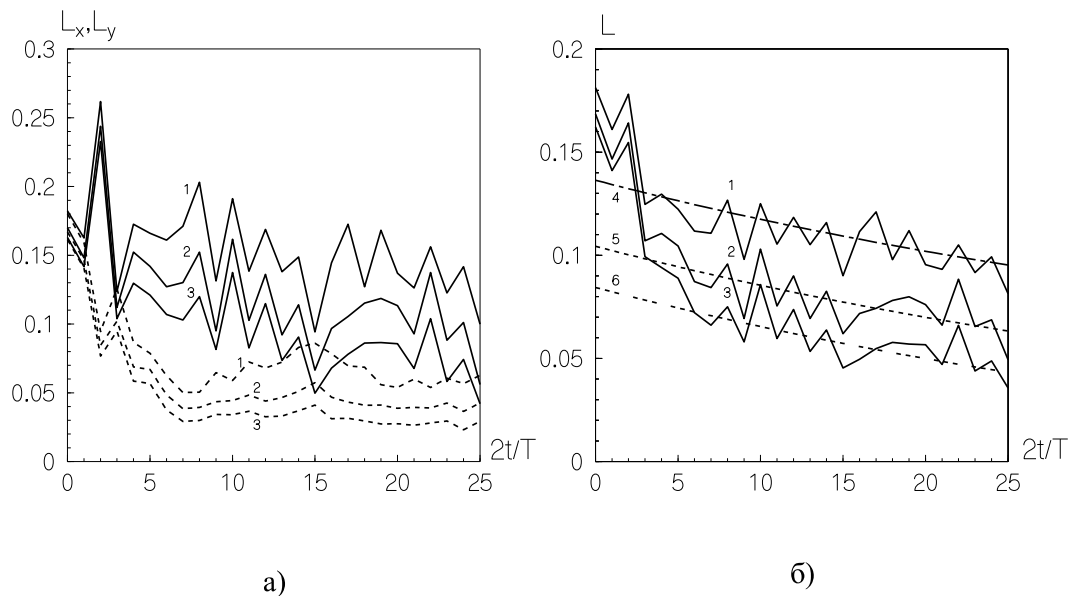


Рис. 17. Динамика масштабов сегрегации (а) и усредненного масштаба (б)

ем времени, из-за анизотропии смесей (см. рис. 11, 12 (а)), безразмерные масштабы сегрегации в x направлении $L_x = L(x)/a$ и в y направлении $L_y = L(y)/a$ будут отличаться по величине. Однако, оба они имеют тенденцию уменьшаться, но не однородно во времени. На рис. 17 (б) дана зависимость усредненного масштаба $L = (L_x + L_y)/2$ во времени для трех размеров ячеек. После двух периодов смешивания графики усредненного масштаба могут быть аппроксимированы показательными функциями вида $c_i + c_0 e^{-ct/T}$. Эти функции показаны пунктирными линиями на рис. 17 (б) как линии 4, 5 и 6, соответственно, с параметрами $c_0 = 0.03$, $c = 0.04$, $c_4 = 0.03$, $c_5 = 0.0$ и $c_6 = -0.02$ (для линий с $i = 4, 5, 6$). При использовании этих аппроксимаций мы можем грубо оценивать после скольких периодов усредненный масштаб сегрегации L будет меньше, чем некоторая заданная величина. Например, при вычислениях с $\delta = 0.05a$ (кривая 2 и линия 5), L становится меньше, чем $\delta/2$ (несмешиваемая «эластичная» область, меньше площади ячейки) приблизительно после 35 периодов.

Таким образом, существование и изменение несмешиваемых «эластичных» областей в картине смеси может быть определено по поведению масштабов сегрегации. Для одной зоны, подобно начальной ситуации с одной круглой каплей, масштабы непосредственно дают размер капли. Для смесей высокого качества, величина масштабов, отличная от нуля, указывают на существование несмешанных областей, которые могут уменьшаться очень медленно (даже стабилизироваться, когда области не уменьшается вообще), несмотря на продолжение смешивания.

Динамика во времени статистических мер первого порядка (квадратичной плотности, интенсивности сегрегации и энтропии) отличаются от динамики масштабов сегрегации. Первые отражают распределение тонких нитей по всей полости, в то время как последние показывают поведение несмешанных областей когерентной структуры. Они также изменяются противоположным образом при изменении размера ячейки: чем меньше размер ячейки, тем хуже качество смешивания согласно статистическим мер первого порядка и лучше согласно меры масштаба сегрегации, которая уменьшается с уменьшением размеров. Поэтому, необходимо использовать меры обоих порядков, чтобы судить, как хорошо или плохо жидкости смешаны. Чтобы оптими-

зировать смешивание для данного периодического протокола необходимо выбрать надлежащее начальное местоположение пятна в полости. Такой выбор должен быть выполнен на основании знания положений и типов периодических точек. Расположение неустойчивых многообразий гиперболических периодических точек в полости (первый главный элемент когерентной структуры) и размер «эластичных» островов, соответствующих эллиптическим периодическим точкам (второй элемент когерентных структур) определяют качество смесей.

6. Заключение

Таким образом, использование аналитического решения для поля скоростей, алгоритма слежения за изменениями контура раздела смешиваемых жидкостей, а также эффективных методов поиска расположения периодических точек (и их типа) позволили:

1) определить главные элементы когерентных структур картин смесей. Первый элемент — тонкие вытянутые и изогнутые нити создаются движением по «автомагистралям» неустойчивого многообразия. Второй элемент образуют плохо смешиваемые «эластичноподобные» области вокруг эллиптических периодических точек;

2) оценивать качество смешивания на основе использования двух независимых критериев: статистических мер первого и второго порядка. При этом первый критерий (будь то квадратичная плотность, интенсивность сегрегации или энтропия) показывает насколько равномерно по всей полости распределена смесь, а второй (масштаб сегрегации) — насколько велики несмешиваемые области;

3) показать, что все меры качества демонстрируют немонотонное поведение во времени, приближаясь к предельным значениям для однородно смешанного состояния;

4) доказать, что смешивание с наибольшим растяжением не всегда соответствует наилучшей по качеству смеси.

На основании вышеизложенного можно заключить, что нами разработана методология исследования и оптимизации процессов двумерного ламинарного смешивания.

Список литературы

- [1] Бернхардт Э. (Ред.) *Переработка термопластичных материалов* // М.: Госхимиздат, 1962.
- [2] Бэтчелор Дж. *Введение в динамику жидкости* // М.: Мир, 1973.
- [3] Жуковский Н. Е. *Кинематика жидкого тела* // Математ. сборник, 1876, т. 8, с. 1–79, 163–238.
- [4] Исаева Т. Л. *Периодические точки в двумерном потоке вязкой жидкости в прямоугольной полости* // Докл. АН Украины, 1994, №11, с. 71–76.
- [5] Канторович Л. В., Крылов В. И. *Приближенные методы высшего анализа* // М.–Л.: Физматгиз, 1962.
- [6] Крылов Н. С. *Работы по обоснованию статистической физики* // М.–Л.: АН СССР, 1950.
- [7] Лихтенберг А., Либерман М. *Регулярная и стохастическая динамика* // М.: Мир, 1984.
- [8] Полак Л. С. *Людвиг Больцман* // М.: Наука, 1987.

- [9] Пуанкаре А. *Избранные труды. Том II* // М.: Наука, 1972.
- [10] Слѣзкин Н. А. *Динамика вязкой несжимаемой жидкости* // М.: ГИТТЛ, 1955.
- [11] Тадмор Р. З., Гогос К. *Теоретические основы переработки полимеров* // М.: Химия, 1984.
- [12] Торнер Р. В. *Теоретические основы переработки полимеров (механика процесса)* // М.: Химия, 1977.
- [13] Шустер Г. *Детерминированный хаос: Введение* // М.: Мир, 1988.
- [14] Aref H. *Stirring by chaotic advection* // J. Fluid Mech., 1984, V. 143, p. 1–24.
- [15] Aref H. *Chaotic advection of fluid particles* // Phil. Trans. R. Soc. Lond., 1990, V. A333, p. 273–289.
- [16] Aref H. *Stochastic particle motion in laminar flows* // Phys. Fluids, 1991, V. A3, p. 1009–1016.
- [17] Aref H. *The development of chaotic advection* // Phys. Fluids, 2002, V. 14, p. 1315–1325.
- [18] Aref H., El Naschie M. S. (Eds.) *Chaos applied to Fluid Mixing* // London, Pergamon, 1994.
- [19] Arnold V. I., Avez A. *Ergodic Problems of Statistical Mechanics* // New York, Benjamin, 1968.
- [20] Baird D. G., Collias D. I. *Polymer Processing: Principles and Design* // Boston, Butterworth, 1995.
- [21] Ben-Naim A. *Is mixing a thermodynamic process?* // Amer. J. Phys., 1987, V. 58, p. 725–733.
- [22] Behringer R. P., Meyers S. D., Swinney H. L. *Chaos and mixing in a geostrophic flow* // Phys. Fluids, 1991, V. A3, p. 1243–1249.
- [23] Bower A. S. *A simple kinematic mechanism for mixing fluid parcels across a meandering jet* // J. Phys. Oceanogr., 1991, V. 21, p. 173–180.
- [24] Brown C. A., Jackson G. A., Brooks D. A. *Particle transport through a narrow tidal inlet due to tidal forcing and implications for larval transport* // J. Geophys. Res., 2000, V. C105, p. 24141–24156.
- [25] Brush S. G. *Foundations of statistical mechanics 1845–1915* // Arch. History Exact Sci., 1968, V. 4, p. 145–183.
- [26] Dankwerts P. V. *The definition and measurement of some characteristics of mixtures* // Appl. Sci. Res., 1952, V. A3, p. 279–296.
- [27] Dankwerts P. V. *Theory of mixtures and mixing* // Research, 1953, V. 6, p. 355–361.
- [28] Eckart C. *An analysis of the stirring and mixing processes in incompressible fluids* // J. Marine Res., 1948, V. 7, № 3, p. 265–275.
- [29] Edwards M. F. *Laminar flow and distributive mixing* // Mixing in the Process Industries, Boston, Butterworth, 1985, p. 202–225.
- [30] Ehrenfest P., Ehrenfest T. *Begriffliche Grundlagen der statistischen Auffassung in der Mechanik* // Encyklopädie der mathematischen Wissenschaften, V. 4/4 Art. 32 Berlin, Teubner, 1911, p. 3–90.
- [31] Ehrenfest P., Ehrenfest T. *The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics* // Ithaca, Cornell University Press, 1959.
- [32] Erwin L. *Principles of laminar fluid/fluid mixing* // Mixing in Polymer Processing, Boston, Dekker, 1991, p. 1–16.

- [33] Franjione J. G., Ottino J. M. *Symmetry concepts for geometric analysis of mixing flows* // Phil. Trans. R. Soc. Lond., 1992, V. A338, p. 3019–323.
- [34] Franjione J. G., Leong C. W., Ottino J. M. *Symmetries within chaos: a route to effective mixing* // Phys. Fluids, 1989, V. A1, p. 1772–1783.
- [35] Gibbs J. W. *Elementary Principles in Statistical Mechanics* // New York, Scribner, 1902. Пер. на русс.: Гиббс Дж. *Основные принципы статистической механики, излагаемые со специальным применением к рациональному обоснованию термодинамики* // М.–Л.: ГИТТЛ, 1946.
- [36] Goodier J. N. *An analogy between the slow motion of a viscous fluid in two dimensions, and systems of plane stress* // Phil. Mag. (Ser. 7), 1934, V. 17, p. 554–576.
- [37] Greene J. M. *Two-dimensional measure-preserving mappings* // J. Math. Phys., 1968, V. 9, p. 760–768.
- [38] Hairer E., Nörset S. P., Wanner G. *Solving Ordinary Differential Equations. I. Non-stiff Problems* // Berlin, Springer, 1987.
- [39] Hardy N., Edwards M. F., Nienow A. W. (Eds.) *Mixing in the Process Industries* // Boston, Butterworth, 1985.
- [40] Irving H. F., Saxton R. L. *Mixing of high viscosity materials*. In: *Mixing. Theory and Practice, II* // Palo Alto, Academic, 1967, p. 169–224.
- [41] Jana S. C., Metcalfe G., Ottino J. M. *Experimental and computational studies of mixing in complex Stokes flows: the vortex mixing flow and multicellular cavity flows* // J. Fluid Mech., 1994, V. 269, p. 199–246.
- [42] Krasnopol'skaya T. S., Meleshko V. V., Peters G. W. M., Meijer H. E. H. *Steady Stokes flow in an annular cavity* // Quart. J. Mech. Appl. Math., 1996, V. 49, p. 593–619.
- [43] Krasnopol'skaya T. S., Meleshko V. V., Peters G. W. M., Meijer H. E. H. *Mixing in Stokes flow in an annular wedge cavity* // Eur. J. Mech., B — Fluids, 1999, V. 18, p. 793–822.
- [44] Krylov N. *Relaxation processes in statistical systems* // Nature, 1944, V. 153, p. 709–710.
- [45] Lebowitz J. L., Penrose O. *Modern ergodic theory* // Phys. Today, 1973, February, p. 23–29.
- [46] Lighthill J. *The recently recognized failure of predictability in Newtonian mechanics* // Proc. R. Soc. Lond., 1986, V. A407, p. 35–50.
- [47] Liu M., Muzzio F. J., Peskin R. L. *Quantification of mixing in aperiodic chaotic flows* // Chaos, Solitons & Fractals, 1994, V. 4, p. 869–893.
- [48] Liu Z., Yang H. *The intergyre chaotic transport* // J. Phys. Oceanogr., 1994, V. 24, p. 1768–1782.
- [49] Maxwell J. C. *On the displacement in a case of fluid motion* // Proc. Lond. Math. Soc., 1870, V. 3, p. 82–87.
- [50] Maxwell J. C. *Essay for the Eranus Club on science and free will. Does the progress of physical science tend to give any advantage to the opinion of necessity (or determinism) over that of the contingency of events and the freedom of the will?* // The Scientific Letters and Papers of James Clerk Maxwell, V. 2, Cambridge, Cambridge University Press, 1995, p. 814–823.
- [51] McKelly J. M. *Polymer Processing* // New York, Wiley, 1962.
- [52] Meleshko V. V. *Steady Stokes flow in a rectangular cavity* // Proc. R. Soc. Lond., 1996, V. A452, p. 1999–2022.

- [53] Meleshko V. V., Krasnopol'skaya T. S., Peters G. W. M., Meijer H. E. H. *Coherent structures and scales of Lagrangian turbulence* // Advances in Turbulence — VI, Dordrecht, Kluwer, 1996, p. 601–604.
- [54] Meleshko V. V., Peters G. W. M. *Periodic points for two-dimensional Stokes flows in a rectangular cavity* // Phys. Letters, 1996, V. A216, p. 87–96.
- [55] Middleman S. *Fundamentals of Polymer Processing* // New York, McGraw-Hill, 1977.
- [56] Mizuta R., Yoden S. *Chaotic mixing and transport barriers in a idealized stratosphere Polar Vortex* // J. Atmos. Sci., 2001, V. 58, p. 2616–2629.
- [57] Moffatt H. K. *Viscous and resistive eddies near a sharp corner* // J. Fluid Mech., 1964, V. 18, p. 1–18.
- [58] Mohr W. D., Saxton R. L., Jepson C. H. *Mixing in laminar-flow systems* // Industr. Eng. Chem., 1957, V. 49, p. 1855–1856.
- [59] Morton W. B. *On the displacements of the particles and their paths in some cases of two-dimensional motion of a frictionless liquid* // Proc. R. Soc. Lond., 1913, V. A89, p. 106–124.
- [60] Ottino J. M. *The Kinematics of Mixing: Stretching, Chaos and Transport* // Cambridge, Cambridge University Press, 1989.
- [61] Ottino J. M. *Mixing and chemical reactions. A tutorial* // Chem. Eng. Sci., 1994, V. 49, p. 4005–4027.
- [62] Ottino J. M., Chella R. *Laminar mixing of polymeric liquids; a brief review and recent theoretical developments* // Polym. Eng. Sci., 1983, V. 23, p. 357–379.
- [63] Ottino J. M., Jana S. C., Chakravarthy V. S. *From Reynolds's stretching and folding to mixing studies using horseshoe maps* // Phys. Fluids, 1994, V. 6, p. 685–699.
- [64] Pierrehumbert R. T. *Large scale horizontal mixing in planetary atmospheres* // Phys. Fluids, 1991, V. A3, p. 1250–1260.
- [65] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery B. P. *Numerical Recipes in FORTRAN: the Art of Scientific Computing* // Cambridge, Cambridge University Press, 1992.
- [66] Rauwendaal C. (Ed.) *Mixing in Polymer Processing* // Boston, Dekker, 1991.
- [67] Reynolds O. *Study of fluid motion by means of coloured bands* // Nature, 1893, V. 50, p. 161–164.
- [68] Ridderinkhof H., Zimmerman J. T. F. *Chaotic stirring in a tidal system* // Science, 1992, V. 258, p. 1107–1111.
- [69] Riecke E. *Beiträge zur Hydrodynamik* // Ann. Phys. Chem. (Ser. 2), 1889, V. 36, p. 322–334.
- [70] Rogerson A. M., Miller P. D., Pratt L. J., Jones C. K. R. T. *Lagrangian motion and fluid exchange in a barotropic meandering jet* // J. Phys. Oceanogr., 1999, V. 29, p. 2635–2655.
- [71] Rothstein D., Henry E., Gollub J. P. *Persistent patterns in transient chaotic fluid mixing* // Nature, 1999, V. 401, p. 770–772.
- [72] Sklar L. *Physics and Chance* // Cambridge, Cambridge University Press, 1993.
- [73] Solomon T. H., Gollub J. P. *Chaotic particle transport in time-dependent Rayleigh-Bénard convection* // Phys. Rev., 1988, V. A38, p. 6280–6286.

- [74] Solomon T. H., Mezić I. *Uniform resonant chaotic mixing in fluid flows* // Nature, 2003, V. 425, p. 376–380.
- [75] Spencer R. S., Wiley R. M. *The mixing of very viscous liquids* // J. Colloid Sci., 1951, V. 6, p. 133–145.
- [76] Stone H. A., Kim S. *Microfluidics: basic issues, applications, and challenges* // AIChE Journal, 2001, V. 47, p. 1250–1254.
- [77] Stremmer M. A., Haselton F. R., Aref H. *Designing for chaos: applications of chaotic advection at the microscale* // Phil. Trans. R. Soc. Lond., 2004, V. A362, p. 1019–1036.
- [78] Stroock A. D., Dertinger S. K. W., Ajdari A., Mezić I., Stone H. A., Whitesides G. M. *Chaotic mixer for microchannels* // Science, 2002, V. 295, p. 647–651.
- [79] Tatterson G. B., Brodkey R. S., Calabrese R. V. *Move mixing technology into the 21st century* // Chem. Eng. Prog., 1991, June, p. 45–48.
- [80] Tucker C. L. *Principles of mixing measurements* // Mixing in Polymer Processing, Boston, Dekker, 1991, p. 101–127.
- [81] Uhl V. W., Gray J. B. (Eds.) *Mixing. Theory and Practice* // Palo Alto, Academic, 1967.
- [82] Welander P. *Studies of the general development of motion in a two-dimensional, ideal fluid* // Tellus, 1955, V. 7, № 2, p. 141–156.
- [83] Wightman A. S. *Statistical mechanics and ergodic theory: an expository lecture* // Statistical Mechanics at the Turn of the Decade, New York, Dekker, 1971, p. 1–31.
- [84] Wightman A. S. *Introduction to the problems* // Regular and Chaotic Motions in dynamic Systems, New York, Plenum, 1985, p. 1–26.